

Entwicklung und Evaluation eines Gewichtsfenstergenerators für das Strahlungstransportprogramm AMOS

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalium

(Dr. rer. nat.)

vorgelegt

der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Dresden

von

Dipl.-Phys. Christoph Jakobi

geboren am 13.03.1985 in Wolmirstedt

Eingereicht am 09.11.2017

Die Dissertation wurde in der Zeit von 03/2013 bis 10/2017 im
Institut für Kern- und Teilchenphysik angefertigt.

1. Gutachter: Prof. Dr. Kai Zuber

2. Gutachter: Prof. Dr. Eduardo Caselli

Betreuer: PD Dr. Jürgen Henniger

Eingereicht am: 09.11.2017

Verteidigt am: 13.03.2018

Überarbeitete Fassung vom 14.03.2018

Kurzfassung

Effizienzsteigernde Methoden haben die Aufgabe, die Rechenzeit von Monte Carlo Simulationen zur Lösung von Strahlungstransportproblemen zu verringern. Dazu gehören weitergehende Quell- oder Geometrievereinfachungen und die Gewichtsfenstertechnik als wichtigstes varianzreduzierendes Verfahren, entwickelt in den 1950er Jahren. Die Schwierigkeit besteht bis heute in der Berechnung geeigneter Gewichtsfenster. In dieser Arbeit wird ein orts- und energieabhängiger Gewichtsfenstergenerator basierend auf dem vorwärts-adjungierten Generator von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS für das Strahlungstransportprogramm AMOS entwickelt und implementiert. Dieser ist in der Lage, die Gewichtsfenster sowohl iterativ zu berechnen und automatisch zu setzen als auch, deren Energieeinteilung selbstständig anzupassen. Die Arbeitsweise wird anhand des Problems der tiefen Durchdringung von Photonenstrahlung demonstriert, wobei die Effizienz um mehrere Größenordnungen gesteigert werden kann. Energieabhängige Gewichtsfenster sorgen günstigstenfalls für eine weitere Verringerung der Rechenzeit um etwa eine Größenordnung. Für eine praxisbezogene Problemstellung, die Bestrahlung eines Personendosimeters, kann die Effizienz hingegen bestenfalls vervierfacht werden. Quell- und Geometrieveränderungen sind gleichwertig. Energieabhängige Fenster zeigen keine praxisrelevante Effizienzsteigerung.

Abstract

The purpose of efficiency increasing methods is the reduction of the computing time required to solve radiation transport problems using Monte Carlo techniques. Besides additional geometry manipulation and source biasing this includes in particular the weight windows technique as the most important variance reduction method developed in the 1950s. To date the difficulty of this technique is the calculation of appropriate weight windows. In this work a generator for spatial and energy dependent weight windows based on the forward-adjoint generator by T.E. BOOTH and J.S. HENDRICKS is developed and implemented in the radiation transport program AMOS. With this generator the weight windows are calculated iteratively and set automatically. Furthermore the generator is able to autonomously adapt the energy segmentation. The functioning is demonstrated by means of the deep penetration problem of photon radiation. In this case the efficiency can be increased by several orders of magnitude. With energy dependent weight windows the computing time is decreased additionally by approximately one order of magnitude. For a practice-oriented problem, the irradiation of a dosimeter for individual monitoring, the efficiency is only improved by a factor of four at best. Source biasing and geometry manipulation result in an equivalent improvement. The use of energy dependent weight windows proved to be of no practical relevance.

Inhalt

1	Einleitung.....	1
2	Theoretische Grundlagen	3
2.1	Strahlungsfeldgrößen und Strahlungstransportgleichung	3
2.2	Monte Carlo Methoden.....	9
2.3	Effizienzsteigernde Methoden	18
3	Gewichtsfenstergenerator	33
3.1	Güte der Ergebnisse	34
3.2	Iterative Berechnung.....	39
3.3	Implementation in AMOS.....	43
4	Anwendungsbeispiele	52
4.1	Tiefe Durchdringung von Photonenstrahlung.....	52
4.2	Gestreute Photonenstrahlung.....	75
5	Zusammenfassung und Ausblick	102
6	Literatur	105
	Anhänge.....	115

1 Einleitung

Für ionisierende Strahlung existiert eine große Anzahl an täglich genutzten Anwendungen sowohl in der medizinischen Diagnostik und Therapie als auch in der Technik [1–9]. Entsprechend der Strahlenschutzgesetzgebung ist die dabei auftretende Strahlenexposition von Mensch und Umwelt so gering wie möglich zu halten. Um diesem Grundsatz gerecht zu werden, ist die zu erwartende Exposition im Vorhinein abzuschätzen. Hierfür werden vor allem computergestützte Strahlenschutzberechnungen eingesetzt. Insbesondere in der Medizin besteht die Forderung, dass der notwendige zeitliche Aufwand für solche Berechnungen so gering wie möglich sein muss.

Die Grundlage für eine detaillierte Berechnung der Exposition in einer vorgegebenen Bestrahlungsgometrie bildet die Strahlungstransportgleichung. In ihrer siebendimensionalen Integralform kann sie durch Monte Carlo Methoden mittels der Simulation des Teilchentransports und der Wechselwirkungen mit Materie gelöst werden [10–12]. Alternative Lösungsmöglichkeiten stellen deterministische Methoden dar [13–15]. Diese sind jedoch im Allgemeinen ungeeignet, da deren Rechen- und Speicheraufwand exponentiell mit der Dimensionalität des Problems ansteigt [16]. Der Aufwand von Monte Carlo Methoden hingegen ist dimensionsunabhängig. Zusätzlich lässt sich die zu berechnende Lösung auf ein interessierendes Gebiet, den Detektor, beschränken.

Die Monte Carlo Methode wird allgemein in analog und nicht-analog unterteilt. Analoge Methoden folgen detaillierten statistisch-physikalischen Modellen, welche die Bedingungen der Aufgabenstellung möglichst genau abbilden. In speziellen Problemstellungen, beispielsweise der tiefen Durchdringung von Materie mit Photonen oder Neutronen, kann die Wahrscheinlichkeit, den Detektor zu erreichen, sehr klein werden. Daher scheitern analoge Methoden an einer praktischen Berechnung der gewünschten Lösung. Um trotzdem ein Ergebnis zu erhalten, müssen effizienzsteigernde Techniken entwickelt werden [17–42]. Diese Techniken verändern die zu Grunde liegenden physikalischen Modelle und sorgen für eine Bevorzugung von Lebensgeschichten mit signifikanten bzw. wahrscheinlichen Beiträgen zum Ergebnis. Dies führt zur nicht-analogen Monte Carlo Methode. Das Ziel ist die Einsparung von Simulationszeit zur Berechnung gleichwertiger Ergebnissen. Zu solchen Techniken gehören auch weiterführende Quell- und Geometrievereinfachungen.

Die Verringerung der Rechenzeit kann auch durch die Optimierung von Algorithmen, der Veränderung von Programmcodes und der Verwendung spezialisierter Computertechnik erzielt werden. Dazu gehören zum Beispiel ein effizienterer Zugriff auf notwendige Daten [43–47], die Verwendung von Grafikkarten [48–52] und der Einsatz von Multithreading [53–55].

Erst durch die Berücksichtigung beider Ansätze, Verbesserung der Ressourcen und nicht-analoge Methoden, wird die bestmögliche Effizienzsteigerung erzielt. Aus diesem Grund ist die Beherrschung von effizienzsteigernden Techniken im Rahmen eines nicht-analogen Monte Carlo Programms unerlässlich.

Die Basis nicht-analoger Methoden bildet die Einführung des Teilchengewichts zusammen mit der Gewichtsfenstertechnik zu dessen Kontrolle, welche in der Problemstellung der tiefen Durchdringung eine Rechenzeiteinsparung um mehrere Größenordnungen realisiert [21, 42]. Diese Technik wurde bereits in den 1950er Jahren entwickelt und ist ein Bestandteil der Strahlungstransportprogramme MCNP [56], MCBEND [57] und Geant4 [58]. Auch das von Arbeitsgruppe Strahlungsphysik an der TU Dresden entwickelte Transportprogramm AMOS [59–65] beherrscht diese Techniken. Daneben existiert eine Vielzahl an weiteren Monte Carlo Programmen, welche jedoch auf analogen Methoden basieren. Dazu gehören unter anderem die Programmpakete MORSE-SGC, PENELOPE, TRIPOLI, TART, FLUKA und EGS [66–71].

Die Aufgabe der Gewichtsfenstertechnik ist die Beeinflussung des Teilchengewichts hinsichtlich einer effizienten Simulation. Dabei sollen Teilchenlebensgeschichten mit potentiell hohem Beitrag zum Ergebnis mittels Teilchensplitting bevorzugt werden. Die Simulation von unbedeutenden Teilchenlebensgeschichten mit vernachlässigbarem Beitrag hingegen soll frühzeitig durch das sogenannte Russisch Roulette abgebrochen werden. Um dieses Ziel zu erreichen, müssen die Gewichtsfensterparameter richtig gewählt werden. Es ist jedoch sogar für erfahrene Anwender nahezu unmöglich, geeignete Fenster orts- und energieabhängig intuitiv zu bestimmen [23]. Folglich ist ein Algorithmus zur Bestimmung optimaler Parameter wünschenswert.

Es existieren bereits verschiedene Ansätzen zur Realisierung eines solchen Gewichtsfenstergenerators [72–80]. Der Generator von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS ist der erste Algorithmus, welcher basierend auf Monte Carlo Methoden die Möglichkeit zur Schätzung von Fensterparametern bietet. Dazu wird die Größe Teilchenwert (Importance) geschätzt und in Gewichtsfenstergrenzen umgerechnet. Er gilt als Maßstab für alternative Ansätze und ist bisher nur im Programmpaket MCNP enthalten. Für die Anwendung des Generators in MCNP muss der Anwender jedoch genug Erfahrung besitzen, um die Güte der erhaltenen Ergebnisse einschätzen zu können. Dazu liefert MCNP nur bei extremen Abweichungen Hilfestellung. Eine Standardunsicherheit des Teilchenwerts wird nicht berechnet. Weiterhin fehlt die Möglichkeit, die bereits berechneten Fenster automatisch während der Simulation setzen zu lassen. Hierfür ist ein Neustart der Simulation notwendig. Außerdem existiert keine detaillierte Beschreibung der Umsetzung des Generators in MCNP.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung und Implementation eines orts- und energieabhängigen Generators im Strahlungstransportprogramm AMOS, basierend auf den Arbeiten von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS. Durch die Angabe einer Standardunsicherheit der berechneten Gewichtsfensterparameter soll dem Anwender ein Maß für die Güte der Ergebnisse bereitgestellt werden. Außerdem ist ein Algorithmus zum automatischen Setzen der Gewichtsfenster wünschenswert.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Strahlungsfeldgrößen und Strahlungstransportgleichung

Die Ausbreitung ionisierender Strahlung basiert auf der Wechselwirkungen von Teilchen mit den Bestandteilen der Materie und ist damit statistischen Prozessen unterlegen [81]. Die Beschreibung von Eigenschaften erfolgt durch den Übergang von stochastischen Größen zu kontinuierlichen Feldgrößen, welche auf Erwartungswerten basieren [82]. Die so definierten Strahlungsfeldgrößen können dabei in zwei Gruppen unterteilt werden, zum einen bezogen auf die Anzahl an Teilchen und zum anderen bezogen auf die Strahlungsfeldenergie [83]. Im Folgenden werden dementsprechend die wichtigsten Größen definiert. Das Ziel ist, die Grundlagen für die Strahlungstransportgleichung darzustellen.

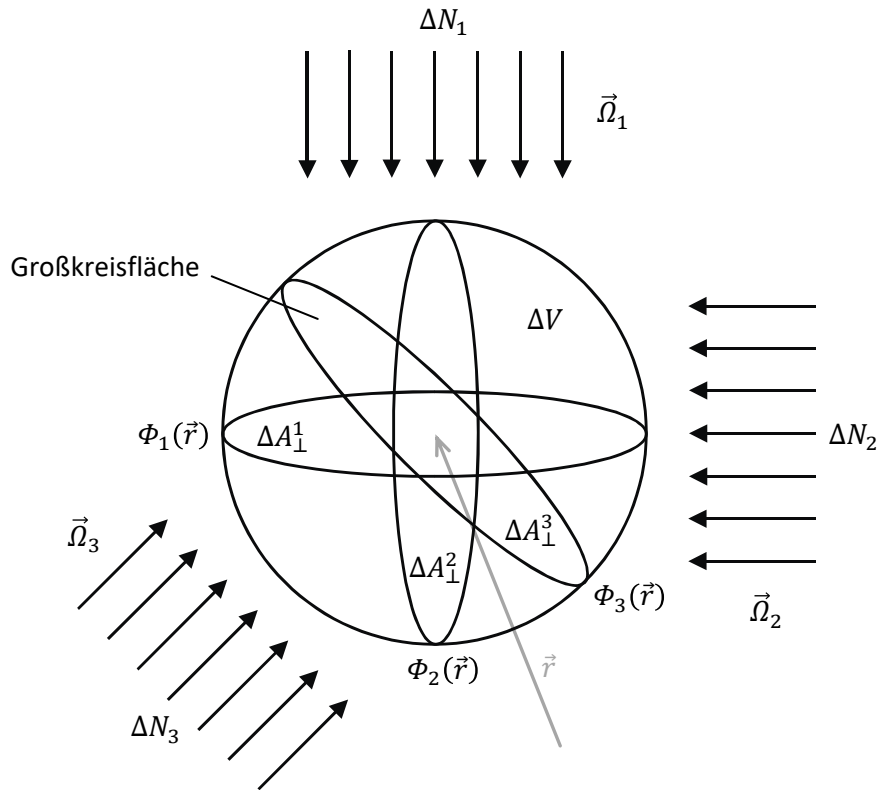


Abbildung 1: Ableitung der Teilchenfluenz Φ (nach Abbildung 1 in [84])

Die Teilchenfluenz Φ ,

$$\Phi(\vec{r}) = \lim_{\Delta A_{\perp} \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta N}{\Delta A_{\perp}} \right), \quad (1)$$

beschreibt die erwartete Anzahl ΔN an Teilchen, welche senkrecht durch die Großkreisfläche ΔA_{\perp} des am Ort \vec{r} befindlichen Kugelvolumens ΔV hindurchtreten [84], Abbildung 1. Formal ergibt sich

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{dN}{dA_{\perp}}. \quad (2)$$

Durch Ableitung nach der Zeit folgt die Teilchenflussdichte

$$\varphi(\vec{r}, t) = \frac{d^2 N}{dA_{\perp} dt}. \quad (3)$$

Weitere Teilcheneigenschaften sind die Energie E und die Bewegungsrichtung $\vec{\Omega}$. Die erwartete Anzahl ΔN an Teilchen, deren Energie sich im Bereich $[E, E + \Delta E]$ befindet, dessen Bewegungsrichtung im Intervall $[\vec{\Omega}, \vec{\Omega} + \Delta \vec{\Omega}]$ liegt und die pro Zeiteinheit senkrecht durch die Großkreisfläche ΔA_{\perp} des am Ort \vec{r} befindlichen Kugelvolumens ΔV hindurchtreten, heißt die spektrale und raumwinkelbezogene Teilchenflussdichte [6]

$$\varphi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \frac{d^2}{dE d\Omega} \varphi(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}). \quad (4)$$

Für den Vektor $\vec{\Omega}$ gilt $|\vec{\Omega}| = 1$.

Um die vom Strahlungsfeld transportierte Energie zu charakterisieren, werden energiebezogene Größen definiert. Dazu wird $\varphi_{E\Omega}$ mit der Teilchenenergie E multipliziert. Das Ergebnis ist die spektrale und raumwinkelbezogene Energieflussdichte [82]

$$\psi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = E \cdot \varphi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}). \quad (5)$$

Durch Integration über die Zeit t , alle Energien E und alle Raumrichtungen $\vec{\Omega}$ wird daraus die Energiefluenz [82]

$$\Psi(\vec{r}) = \int_0^t \int_0^{\infty} \int_{4\pi} d\Omega' dE' dt' \psi_{E\Omega}(\vec{r}, t', E', \vec{\Omega}'). \quad (6)$$

Analog zur Definition (5) ergeben sich vektorielle Strahlungsfeldgrößen durch Multiplikation mit $\vec{\Omega}$. Es folgen die vektorielle spektrale und raumwinkelbezogene Teilchenflussdichte

$$\vec{\varphi}_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \vec{\Omega} \cdot \varphi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}), \quad (7)$$

und die entsprechende vektorielle Energieflussdichte

$$\vec{\psi}_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \vec{\Omega} \cdot E \cdot \varphi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}). \quad (8)$$

Mittels Integration über Zeit t , Energie E und Raumrichtung $\vec{\Omega}$ ergeben sich die vektorielle Fluenz $\vec{\Phi}$ und die vektorielle Energiefluenz $\vec{\Psi}$. Letztere ist die zentrale Feldgröße in der numerischen Dosimetrie [85]. Für die Energiedosis D , der vom Strahlungsfeld deponierten Energie dE_D im Massenelement dm , gilt

$$D = \frac{dE_D}{dm} = -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \cdot \vec{\Psi} \quad (9)$$

mit der Massendichte ρ .

Zur Ableitung einer Strahlungstransportgleichung ist die Einführung von Teilchendichten zweckmäßig, da bei allen Feldgrößen die erwartete Anzahl an Teilchen im Kugelvolumen ΔV am Ort \vec{r} betrachtet wird. Die Teilchendichte $n(\vec{r})$ ist definiert als

$$n(\vec{r}) = \frac{dN}{dV} \quad (10)$$

und umfasst alle Strahlungsteilchen einer Teilchensorte. Für eine detaillierte Betrachtung erfolgt die Ableitung nach Energie, Bewegungsrichtung und Zeit,

$$\dot{n}_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \frac{d^4 N}{dV dt dE d\Omega}. \quad (11)$$

Formal ergibt sich die Teilchendichte $\dot{n}_{E\Omega}$ aus der spektrale und raumwinkelbezogene Teilchenflussdichte $\varphi_{E\Omega}$ und der Geschwindigkeit v der Teilchen über

$$\dot{n}_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \frac{1}{v} \varphi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}). \quad (12)$$

Die Strahlungstransportgleichung beschreibt, wie sich die zeitliche Änderung der Teilchendichte $\dot{n}_{E\Omega}$ im Kugelvolumen ΔV am Ort \vec{r} zum Zeitpunkt t durch Wechselwirkung mit Materie ergibt. Dabei wird zwischen Teilchenquellen und -senken unterschieden. Dies ist in Abbildung 2 veranschaulicht.

In ΔV eintretende Teilchen haben ihren Ursprung entweder in fixen Quellen oder in Streuquellen. Die dazugehörigen Teilchendichten sind die spektrale und raumwinkelbezogene Quellteilchendichte

$$s_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \frac{d^4 N_{\text{fix}}}{dV dt dE d\Omega} \quad (13)$$

und die spektrale und raumwinkelbezogene Streuteilchendichte

$$\varsigma_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \frac{d^4 N_{\text{Streu}}}{dV dt dE d\Omega}. \quad (14)$$

Die Summe führt zur spektralen und raumwinkelbezogenen Emersionsteilchendichte

$$\chi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = s_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) + \varsigma_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}). \quad (15)$$

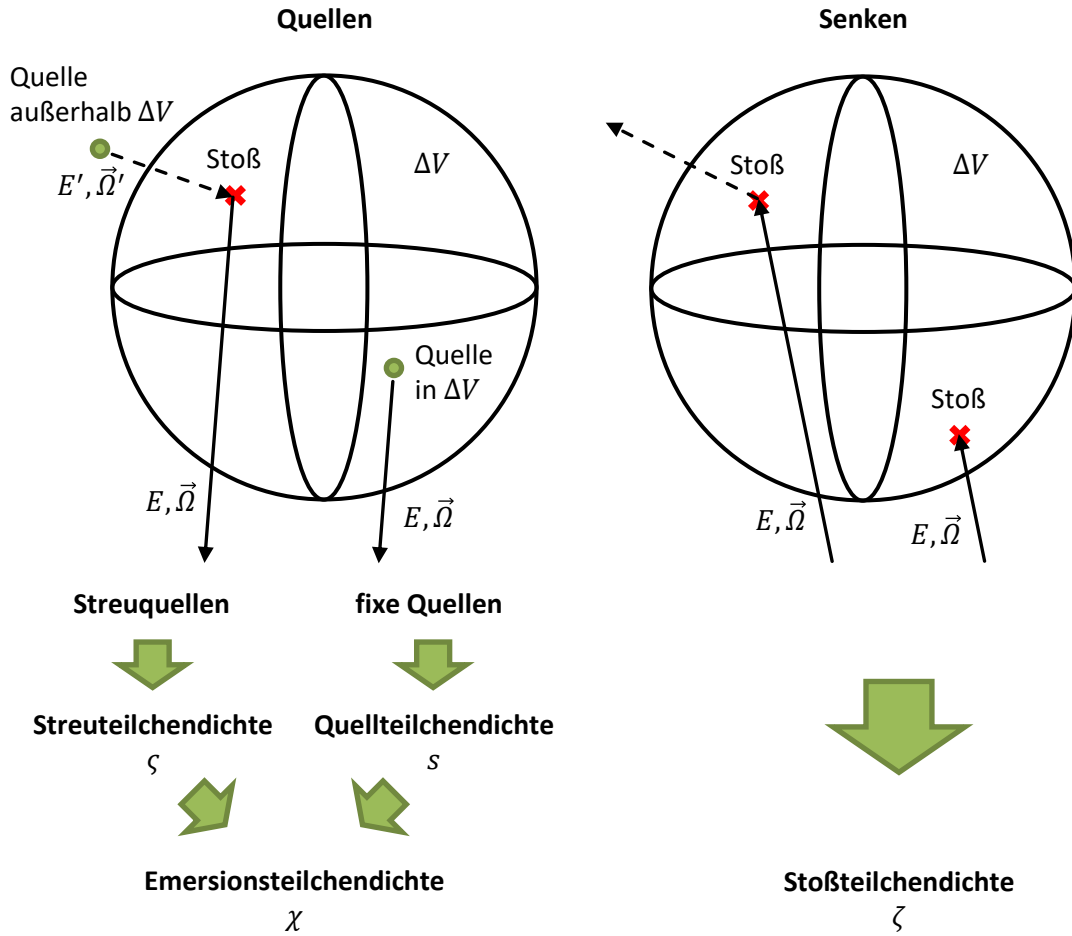


Abbildung 2: Teilchenquellen und -senken für die betrachtete Energie E und die betrachtete Bewegungsrichtung $\vec{\Omega}$ im Kugelvolumen ΔV am Ort \vec{r} zum Zeitpunkt t

Fixe Quellen sind ortsfest und werden nicht vom Strahlungsfeld beeinflusst. Streuquellen hingegen entstehen erst durch das Strahlungsfeld und sind ein Maß für die erwartete Anzahl Teilchen, die in ΔV einer Wechselwirkung (Stoß) unterliegen und dadurch in die betrachtete Energie E und die betrachtete Bewegungsrichtung $\vec{\Omega}$ hineingestreut werden. Durch den Stoß ändert sich die Energie von E' nach E und die Bewegungsrichtung von $\vec{\Omega}'$ nach $\vec{\Omega}$, wobei E' und $\vec{\Omega}'$ beliebig sind. Dies kann mit Hilfe der Wirkungsquerschnittsdichte Σ_s für Streuung beschrieben werden. Sie ist ein Maß für die mittlere Anzahl an Streuprozessen pro Wegelement. Es gilt

$$\zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty \int_{4\pi} d\Omega' dE' \frac{d^2 \Sigma_s}{dE d\Omega}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') \cdot \varphi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E', \vec{\Omega}'). \quad (16)$$

Alle Teilchen mit der Energie E und der Bewegungsrichtung $\vec{\Omega}$ treten in eine Teilchensenke, wenn sie in ΔV einem Stoß unterliegen. Dadurch werden sie entweder gestreut oder absorbiert. In beiden Fällen ändern sich Energie oder Bewegungsrichtung. Die dazugehörige Teilchendichte ist die spektrale und raumwinkelbezogene Stoßteilchendichte

$$\zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \frac{d^4 N_{\text{Stoß}}}{dV dt dE d\Omega}. \quad (17)$$

Mit Hilfe der totalen Wirkungsquerschnittsdichte Σ_t , der mittleren Anzahl an Wechselwirkungsprozessen pro Wegelement, ergibt sich

$$\zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \Sigma_t(\vec{r}, E) \cdot \varphi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \frac{\varphi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})}{\Lambda_t(\vec{r}, E)}. \quad (18)$$

Hierbei ist Λ_t die mittlere freie Weglänge [86].

Die Differenz aus den ein- und austretenden Teilchen führt zur Bilanzgleichung

$$\dot{n}_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = s_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) + \varsigma_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) - \zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}). \quad (19)$$

Durch Einsetzen von Gleichung (12) und Berechnen der totalen Ableitung nach der Zeit ergibt sich die Strahlungstransportgleichung BOLTZMANN'schen Typs,

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \varphi_{E\Omega}}{\partial t}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \\ s_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) \\ + \int_0^\infty \int_{4\pi} d\Omega' dE' \frac{d^2 \Sigma_s}{dE d\Omega}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') \cdot \varphi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E', \vec{\Omega}') \\ - \Sigma_t(\vec{r}, E) \cdot \varphi_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}), \end{aligned} \quad (20)$$

als siebendimensionale Integro-Differentialgleichung.

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung mit numerischen Methoden ist insbesondere wegen der Überführung der Ableitungen in Differenzenquotienten numerisch instabil [76, 87]. Hinzu kommen Unstetigkeiten in der Darstellung des Quellterms $s_{E\Omega}$ und im Verlauf der Wirkungsquerschnittsdichte Σ_t . So ist zum Beispiel die Energieabhängigkeit des Photoeffekts durch Sprünge bei den Ionisationsenergien der Elektronenenergieniveaus gekennzeichnet. Aus diesem Grund ist eine Überführung von (20) in eine Integralgleichung wünschenswert. Diese ist zum Beispiel in [66, 81] und [44] ausführlich dargestellt. Das Ergebnis ist die integrale Stoßteilchendichtegleichung,

$$\begin{aligned} \zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \mathcal{T}(\vec{r}'' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}, t'' \rightarrow t) \cdot s_{E\Omega}(\vec{r}'', t'', E, \vec{\Omega}) \\ + \mathcal{T}(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}, t' \rightarrow t) \cdot \mathcal{C}(\vec{r}', E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \cdot \zeta_{E\Omega}(\vec{r}', t', E', \vec{\Omega}'). \end{aligned} \quad (21)$$

Die Integraloperatoren \mathcal{C} und \mathcal{T} , Stoß- bzw. Transportintegraloperator, sind hierbei über

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}, t' \rightarrow t) = \int_0^\infty dR \Sigma_t(\vec{r}, E) e^{-\int_0^R \Sigma_t(\vec{r}' - \vec{R}', \vec{\Omega}, E) dR'} \quad (22)$$

und

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \iint \int_{4\pi}^{\infty} d\Omega' dE' \frac{\frac{d^2 \Sigma_s}{dE d\Omega}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}')}{\Sigma_t(\vec{r}, E')} \quad (23)$$

definiert. Nach (21) setzt sich die Stoßteilchendichte $\zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ im Kugelvolumen ΔV am Ort \vec{r} aus zwei Beiträgen zusammen. Dazu gehören alle Teilchen, die aus fixen Quellen $s_{E\Omega}(\vec{r}', t', E, \vec{\Omega})$ und aus Streuquellen $\mathcal{C} \cdot \zeta_{E\Omega}(\vec{r}', E', \vec{\Omega}', t')$ entlang der Geraden

$$\vec{r}' = \vec{r}'(R) = \vec{r} - R \cdot \vec{\Omega}, \quad R \in [0, \infty), \quad (24)$$

in Richtung $\vec{\Omega}$ mit der Energie E und der Geschwindigkeit v emittiert werden, im Zeitintervall $\Delta t = t' - t$ mit

$$t' = t'(R) = t - \frac{R}{v} \quad (25)$$

wechselwirkungsfrei zum Ort \vec{r} gelangen und dort einer Wechselwirkung unterliegen werden. Dies ist in Abbildung 3 veranschaulicht.

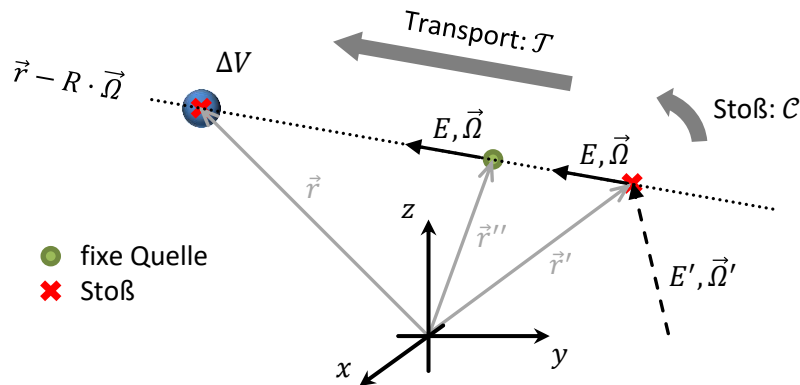


Abbildung 3: Beiträge zur Stoßteilchendichte im Kugelvolumen ΔV am Ort \vec{r} zum Zeitpunkt t

Die integrale Form der Strahlungstransportgleichung, Gleichung (21), ist eine FREDHOLMSche Integralgleichung 2. Art, deren allgemeine Lösung als LIOUVILLE-NEUMANN-Reihe,

$$\zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \sum_{i=0}^{\infty} (\mathcal{T} \cdot \mathcal{C})^i \cdot \mathcal{T} \cdot s_{E\Omega}(\vec{r}', E', \vec{\Omega}', t') \quad (26)$$

darstellbar ist [16, 88]. Mit Hilfe der Lösung $\zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ kann ein interessierender Effekt I allgemein mit der sogenannten Responsefunktion $f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}$ über

$$I = \iiint_{\Delta\Omega} \int_{\Delta E} \int_{\Delta t} \iiint_{\Delta V} dV dt dE d\Omega f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) \cdot \zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) \quad (27)$$

für ein betrachtetes Volumen ΔV , im Zeitintervall Δt , im Energiebereich ΔE und im Raumwinkelbereich $\Delta \Omega$ berechnet werden. Dabei wird vorausgesetzt, dass $f^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ in diesem Bereich beschränkt ist. Solch ein interessierender Effekt kann zum Beispiel die spektrale Teilchenfluenz Φ_E gemittelt über das Detektorvolumen $V_D = \Delta V$ sein. In diesem Fall gilt $I = \Phi_E(\vec{r}, E)$ und

$$f^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}} = f^{\zeta_{E\Omega \rightarrow \Phi_E}} = \frac{\delta(E - E')}{\Sigma_t(\vec{r}, E)}, \quad (28)$$

für $\Delta \Omega = 4\pi$. Hier ist δ die DIRAC-Delta-Distribution.

2.2 Monte Carlo Methoden

2.2.1 Grundlagen

Monte Carlo Methoden sind eine stochastische Methode im Bereich der numerischen Mathematik [89], welche zur Lösung von Integrationsaufgaben verwendet werden [16], [90]. Des weiteren werden Monte Carlo Methoden speziell bei der Berechnung von Optimierungsaufgaben, bei Metropolis-Algorithmus [91, 92], bei der Lösung von linearen Gleichungssystemen und Randwertproblemen angewandt. Diese Problemstellungen lassen sich jedoch auf die Formulierung einer Integrationsaufgabe zurückführen [16].

Allgemein basieren Monte Carlo Methoden auf der Modellierung eines Zufallsexperiments mittels einer Zufallsvariable X . Das Zufallsexperiment wird nun N Mal realisiert, was mathematisch durch das Erheben einer Stichprobe vom Umfang N identischer und zu X gleich verteilter Zufallsvariablen $X_1, \dots, X_N \sim X$ ausgedrückt wird. Das Ziel ist die Berechnung eines Ergebnisses I , welches mit Hilfe einer geeigneten Schätzfunktion $\tilde{I}(X_1, \dots, X_N)$ ermittelt wird [89]. Ist dieser Schätzer erwartungstreu, so gilt für dessen Erwartungswert $\mathbb{E}(\tilde{I})$

$$\mathbb{E}(\tilde{I}) = I \quad (29)$$

Eine übliche erwartungstreu Schätzfunktion ist das arithmetische Mittel

$$\tilde{I}(X_1, \dots, X_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i. \quad (30)$$

Für $N \gg 1$ ist \tilde{I} aufgrund des zentralen Grenzwertsatzes annähernd Normalverteilt [76]. Somit ergibt sich für den Vertrauensbereich [93, 94]

$$\left[\tilde{I} - z_{(1-\alpha/2)} \cdot \frac{\tilde{\sigma}_X}{\sqrt{N}}, \tilde{I} + z_{(1-\alpha/2)} \cdot \frac{\tilde{\sigma}_X}{\sqrt{N}} \right]. \quad (31)$$

Die Funktion $z_{(1-\alpha/2)}$ ist das $(1 - \alpha/2)$ -Quantil der Standardnormalverteilung. Das Signifikanzniveau α bestimmt demnach, mit welcher Wahrscheinlichkeit das zu berechnende Ergebnis \tilde{I} im Intervall (31) liegt. Für $\alpha = 0,3174$ gilt $z_{(1-\alpha/2)} \approx 1$ und im Mittel befinden sich 68,26% der Werte von $\tilde{I}(X_1, \dots, X_N)$ im Vertrauensbereich.

Der Parameter $\tilde{\sigma}_X$ ist die Wurzel aus der empirische Varianz $\tilde{\sigma}_X^2$ der Verteilung der Zufallsvariable X . Es gilt

$$\tilde{\sigma}_X^2 = \frac{1}{N-1} \left(\sum_{i=1}^N X_i^2 - \frac{1}{N} \left[\sum_{i=1}^N X_i \right]^2 \right). \quad (32)$$

Nach dem „Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement“ (GUM) [95] der internationalen Organisation für Normung (ISO) Standardunsicherheit des Mittelwerts wird der Quotient $\tilde{\sigma}_X/\sqrt{N}$ als Standardunsicherheit bezeichnet und mittels

$$\Delta \tilde{I} = \frac{\tilde{\sigma}_X}{\sqrt{N}} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i^2 - \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \right]^2 \right)}. \quad (33)$$

berechnet.

Zur Berechnung eines gegebenen Integrals

$$I = \int_a^b dx p(x) \quad (34)$$

mit Monte Carlo Methoden wird die Funktion $m(x)$ zunächst in eine Dichtefunktion $f(x)$ und in eine Restfunktion $h(x)$ zerlegt, sodass gilt $m(x) = h(x) \cdot f(x)$. Die Zufallsvariable X und das zugehörige Zufallsexperiment werden anschließend entsprechend $f(x)$ modelliert. Die Schätzfunktion zur Berechnung des Integrals lautet

$$\tilde{I} = \tilde{I}(X_1, \dots, X_N) = \frac{\eta}{N} \sum_{i=1}^N h(X_i). \quad (35)$$

Der Parameter η ist hierbei die Norm der Funktion $f(x)$,

$$\eta = \int_a^b dx f(x). \quad (36)$$

Für die Standardunsicherheit von \tilde{I} folgt

$$\Delta \tilde{I} = \frac{\tilde{\sigma}_X}{\sqrt{N}} = \sqrt{\frac{\eta^2}{N-1} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(X_i)^2 - \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(X_i) \right]^2 \right)}. \quad (37)$$

Die Lösung von Strahlungstransportproblemen basiert auf der Berechnung einer physikalischen Größe, welche über Gleichung (27),

$$I = \iiint_{\Delta\Omega} \int_{\Delta E} \int_{\Delta t} \int_{\Delta V} dV dt dE d\Omega f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) \cdot \zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}), \quad (38)$$

mit der Stoßteilchendichte $\zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ zusammenhängt. Es handelt sich folglich um eine Integrationsaufgabe und kann mit Monte Carlo Methoden gelöst werden. Die formale Herleitung der Zufallsvariable und der dazugehörigen Schätzfunktion ist im Anhang A dargestellt. Hierbei wird die Stoßteilchendichte $\zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ als mathematische Dichtefunktion interpretiert. Das dadurch definierte Zufallsexperiment kann als die Lebensgeschichte oder Historie eines Strahlungsteilchens interpretiert werden.

2.2.2 Teilchenlebensgeschichten

Die Lebensgeschichte eines Strahlungsteilchens im Rahmen einer Monte Carlo Simulation wird innerhalb einer gegebenen Geometrie geschrieben. Diese beinhaltet mindestens eine Quelle und einen Detektor, Abbildung 4. Die Geometrie ist endlich und von einem vollständigen Absorber, dem sogenannten Escape, umgeben. Erreicht das Teilchen den Escape, so wird die Lebensgeschichte beendet.

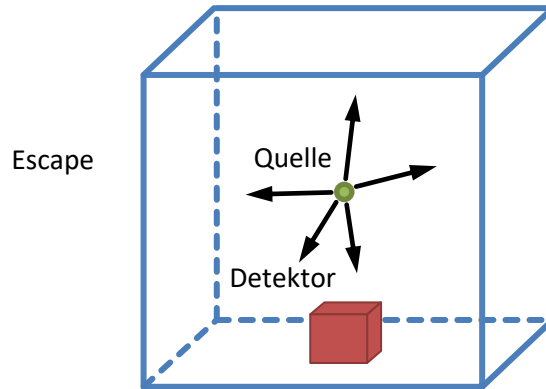


Abbildung 4: Geometrie zur Simulation von Teilchenlebensgeschichten

Jede Lebensgeschichte beginnt mit der Quellemission, bei der Emissionsenergie E_0 und -richtung $\vec{\Omega}_0$, -ort \vec{r}_0 und -zeit t_0 festgelegt werden, Abbildung 5. Anschließend erfolgt der Teilchentransport. Hierbei wird der wechselwirkungsfreie Weg anhand der Dichte und der Elementzusammensetzung des Materials bestimmt. Das Ergebnis ist der Wechselwirkungsort \vec{r}_1 zum Zeitpunkt t_1 .

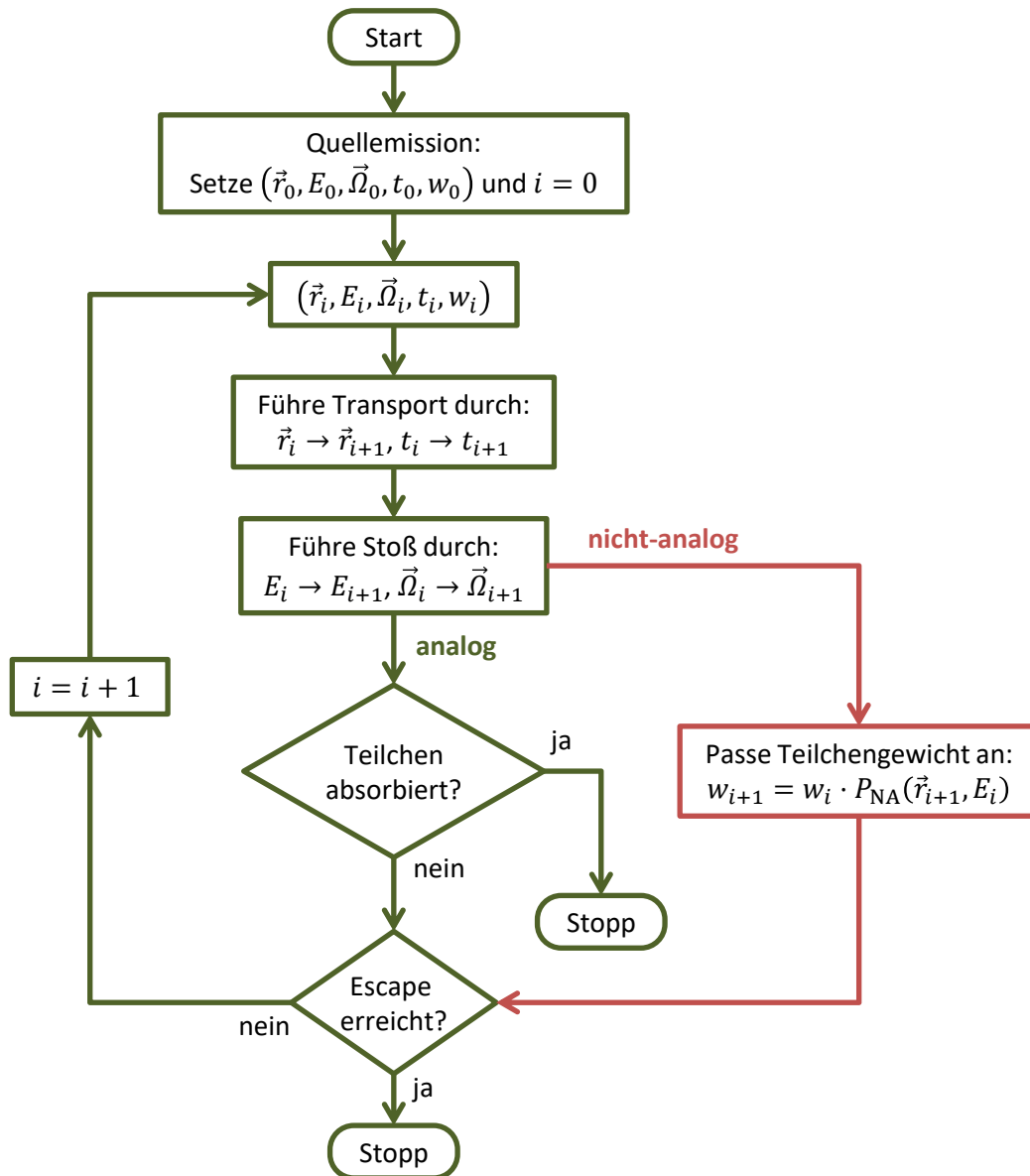


Abbildung 5: Allgemeines Vorgehen zur Berechnung der Lebensgeschichte eines Strahlungsteilchens innerhalb einer analogen Simulation (grün) und die Veränderung für nicht-analoge Simulation (rot)

Am Ort \vec{r}_1 erfolgt nun die Durchführung des Stoßes. Dabei wird die Art W der Wechselwirkung entsprechend ihrer energie- und materialabhängigen Wirkungsquerschnittsdichte $\Sigma_W(\vec{r}_i, E_i)$ bestimmt. Eine Streuung verändert die Flugrichtung und gegebenenfalls die Teilchenenergie, formal $\vec{\Omega}_0 \rightarrow \vec{\Omega}_1$ und $E_0 \rightarrow E_1$. Das Teilchen wird anschließend wieder transportiert. Im Fall einer Absorption ist $E_1 = 0$ und die Lebensgeschichte ist beendet.

Transport- und Stoßprozess wechseln sich solange ab, bis das Teilchen entweder absorbiert ist oder den Escape erreicht hat. Geladene Teilchen wie Elektronen und Protonen können nicht absorbiert werden. Üblicherweise wird daher zusätzlich eine untere Energieschwelle eingeführt. Bei Unterschreiten wird die Lebensgeschichte beendet. Formal hat das Teilchen dadurch den Escape erreicht. Eine weitere Möglichkeit besteht im Festlegen einer oberen Zeitgrenze, dem zeitlichen Escape.

Trifft das Teilchen entlang seines Lebenswegs auf den Detektor, so wird der Beitrag zum zu schätzenden Detektorergebnis berechnet. Dazu gehören beispielsweise der zurück gelegte wechselwirkungs-freie Weg als Beitrag zur mittleren Teilchenfluenz oder die bei Wechselwirkungen lokal deponierte Energie als Beitrag zur Dosis.

Diese Art der Monte Carlo Simulation folgt der physikalischen Natur und wird daher als analoge Simulation bezeichnet. Vor allem für Abschirmberechnungen für Photonen- oder Neutronenquellen kann die hohe Absorptionswahrscheinlichkeit jedoch dafür sorgen, dass nur ein geringer Anteil an Teilchen den Detektor erreicht. Um die frühzeitige Beendigung der Lebensgeschichte bei Absorption zu vermeiden, wird das Teilchengewicht w eingeführt. Anstelle von Absorption wird bei jedem Stoß das Gewicht reduziert, Abbildung 5. Die Anpassung erfolgt mit Hilfe der Nichtabsorptionswahrscheinlichkeit $P_{NA}(\vec{r}, E)$ im Material am Ort \vec{r} zur Energie E [96],

$$w_{i+1} = w_i \cdot P_{NA}(\vec{r}, E). \quad (39)$$

Die Absorption findet folglich implizit statt. Die auf diese Weise veränderte Simulation wird als nicht-analog bezeichnet. Die Wirkungsweise ist in Abbildung 6 veranschaulicht.

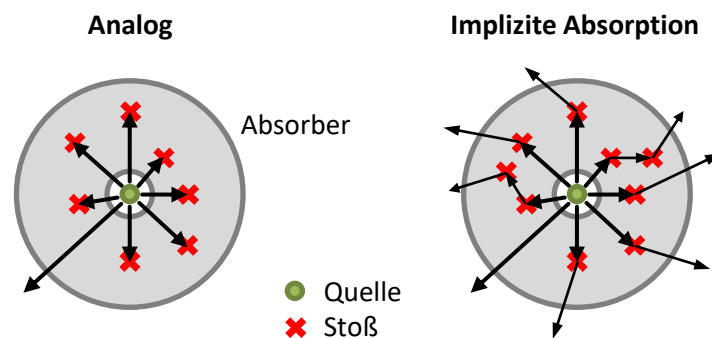


Abbildung 6: Vergleich analoger Monte Carlo Methode mit Simulation mit impliziter Absorption

Wie von I. SOBOL [97] gezeigt, sorgt implizite Absorption für eine Reduktion der Varianz der Beiträge zum Schätzer. Da jedoch bei jeder Wechselwirkung Absorption und Streuung gleichzeitig simuliert werden und eine Abbruchbedingung fehlt, steigt die mittlere Rechenzeit pro Lebensgeschichte an. Implizite Absorption ist folglich im Allgemeinen nicht gleichzeitig effizienzsteigernd.

Aus diesem Grund ist es notwendig, einen Kontrollmechanismus mit einer gewichtsabhängigen Abbruchbedingung zu verwenden. Dieser muss dafür sorgen, dass Lebensgeschichten mit nicht signifikanten Beiträgen frühzeitig beendet und solche mit bedeutsamen Beiträgen bevorzugt werden. Das Werkzeug hierfür ist die Gewichtsfenstertechnik.

Nicht-analoge Monte Carlo Methoden stehen im Fokus von effizienzsteigernden Methoden. Das Teilchengewicht dient dabei als Instrument, Veränderungen gegenüber der physikalischen Realität auszugleichen. Diese Veränderungen resultieren aus Transformationen der Integralkerne, wodurch deren Norm und damit das Teilchengewicht beeinflusst werden. Das Gewicht wird dadurch zu einem Instrument, mit dem die Erwartungstreue der Simulation erhalten bleibt.

Ein weiterer Aspekt bei der Simulation einer Teilchenlebensgeschichte ist die Berücksichtigung der Sekundärteilchenerzeugung. Beispielsweise werden durch inkohärente Streuung und Photoeffekt bei Photonen und durch Anregungs- und Ionisationsbremsung bei geladenen Teilchen Sekundärelektronen, AUGER-Elektronen oder Röntgenphotonen emittiert [8]. Für detaillierte Berechnungen der Strahlungsausbreitung mit Monte Carlo Methoden muss zusätzlich der Prozess der Sekundärteilchenerzeugung eingeführt werden. Die Strahlungstransportgleichung BOLTZMANN'schen Typs, Gleichung (20), enthält keinen Term, der die Erzeugung von allen möglichen Sekundärteilchen explizit beschreibt. Es werden nur Sekundärteilchen vom gleichen Typ berücksichtigt.

Sekundärteilchen, welche nicht dem Typ des Primärteilchens entsprechen, können durch Kopplung der Simulationen unterschiedlicher Teilchenarten berücksichtigt werden [96]. Ort, Zeitpunkt, Richtung, Energie und Gewicht der Quellemission in der Sekundärteilchenlebensgeschichte werden dabei durch das Ergebnis der Wechselwirkung des Primärteilchens festgelegt. Alle bei einer impliziten Absorption entstehenden Sekundärteilchen erhalten das Gewicht

$$w = w_i \cdot (1 - P_{\text{NA}}(\vec{r}, E)). \quad (40)$$

Im Strahlungstransportprogramm AMOS bezieht sich die Nichtabsorptionswahrscheinlichkeit P_{NA} auf die Wahrscheinlichkeit, dass ein Photoeffekt stattfindet. Da AMOS speziell für Problemstellungen im Photonenenergiebereich bis zu wenigen MeV entwickelt wird, ist die Wahrscheinlichkeit für Paarbildung in den meisten Fällen null oder nur sehr gering. Daher wird die Absorption durch Paarbildung neben kohärenter und inkohärenter Streuung als möglicher nicht-analoger Stoßprozess durchgeführt.

Entstehen beim Stoßprozess Sekundärphotonen oder -elektronen, erhalten diese das gleiche Gewicht

$$w = w_i \cdot P_{\text{NA}}(\vec{r}, E), \quad (41)$$

wie das Primärteilchen. Sie werden nach Beendigung der Lebensgeschichte des Primärteilchens simuliert. In AMOS erfolgt Der Elektronentransport grundsätzlich analog.

2.2.3 Monte Carlo Detektoren

Eigenschaften ionisierender Strahlung werden mit Strahlungsdetektoren gemessen, welche auf dem Prinzip der Wechselwirkung von Teilchen mit Materie beruhen [6]. Der dabei stattfindende Energieübertrag verursacht eine messbare Zustandsänderung. Beispielsweise werden in Gasen und Halbleitern freibewegliche Ladungsträger erzeugt, die in messbare Ladungsimpulse umgewandelt werden. Wichtige Eigenschaften sind dabei Impulsdauer, mittlere elektrische Ladung und Impulshöhe.

Die Anzahl an Pulsen pro Zeiteinheit ist ein Maß für Teilchenflussdichte φ . Mit Hilfe der in einem Zeitintervall erzeugten elektrischen Gesamtladung können Teilchenfluenz Φ und Energiedosis D bestimmt werden. In einer zu simulierenden stationären Problemstellung mit Detektoren für solche Messgrößen ist demnach die Schätzung der spektralen Fluenz Φ_E zielführend. Diese kann durch Integration und Ableitung in die Größen Ψ , D , φ und ψ umgerechnet werden. Hinzu kommt die Möglichkeit zur Berechnung von Reaktionsraten ausgewählter Wechselwirkungen [96] durch Multiplikation mit der Wechselwirkungsichte Σ .

Alle Stöße einer Teilchenlebensgeschichte in einer Monte Carlo Simulation liefern zunächst eine Stichprobe für die Stoßteilchendichte $\zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ im Kugelvolumen ΔV am Ort \vec{r} . Nach Gleichung (18) lässt sich daraus eine Stichprobe für die spektrale und raumwinkelbezogene Fluenz $\Phi_{E\Omega}$ durch Multiplikation mit der totalen mittleren freien Weglänge Λ_t berechnen. Die spektrale Fluenz Φ_E ergibt sich letztendlich durch Integration,

$$\Phi_E(\vec{r}, E) = \iint_{4\pi} \int_{\Delta t} dt' d\Omega' \frac{\zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t', E, \vec{\Omega}')}{\Sigma_t(\vec{r}, E)}. \quad (42)$$

Entsprechend dieses Vorgehens ist es möglich, mit Hilfe der allgemeinen Darstellung

$$I = \iiint_{\Delta\Omega} \int_{\Delta E} \int_{\Delta t} \int_{\Delta V} dV' dt' dE' d\Omega' f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q') \zeta_{E\Omega}(q'), \quad (43)$$

Gleichung (38), mit $q' = (\vec{r}', t', E', \vec{\Omega}')$ und einer geeigneten Responsefunktion $f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q)$, auch andere Größen zu berechnen. Nach Anhang A folgt daraus formal

$$\tilde{I} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=0}^{n(k)} f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q_i^k) w_i^k \theta(q_i^k | \Delta\Gamma) \right). \quad (44)$$

als Monte Carlo Schätzgröße \tilde{I} für die physikalischen Größe I [96]. Die Variablen k und i zählen die simulierten Lebensgeschichten und die darin enthaltenen Streuordnungen. Bei der Ordnung $n(k)$ wurde die Lebensgeschichte beendet. Die Größe w_i^k ist das Teilchengewicht vor dem $(i + 1)$ -ten Stoß in der k -ten Lebensgeschichte. Weiterhin ist $\theta(q_i^k | \Delta\Gamma)$ die Indikatorfunktion für das Detektorgebiet $\Delta\Gamma = (\Delta V, \Delta t, \Delta E, \Delta\Omega)$ des Phasenraums,

$$\theta(q_i^k | \Delta\Gamma) = \begin{cases} 1, & q_i^k \in \Delta\Gamma \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}. \quad (45)$$

Da die Stoßteilchendichte $\zeta_{E\Omega}$ die gesuchte Größe in der Strahlungstransportgleichung BOLTZMANN'schen Typs darstellt, heißen solche Schätzer BOLTZMANN'sche Schätzer.

Die Berechnung der spektralen Information eines Schätzers mittels Monte Carlo Simulation ist jedoch nicht kontinuierlich möglich. Für eine kontinuierliche Energieabhängigkeit einer Schätzgröße $I_E(E)$ in einem interessierenden Bereich $[E_{\min}; E_{\max}]$ müsste die Responsefunktion $f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q)$ die DIRAC-Delta-Distribution $\delta(E' - E)$ [98] enthalten. Dann bezöge sich $f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q)$ auf genau eine Energie $E \in \mathbb{R}$. Folglich müssten unendlich viele Detektoren für alle Energien zwischen E_{\min} und E_{\max} definiert werden, was aufgrund der diskreten und endlichen Fließkommadarstellung eines Computers [99] nicht möglich ist. Selbst bei Verwendung aller darstellbaren diskreten Energiewerte wäre eine Konvergenz des Schätzers praktisch nicht realisierbar, da eine 32-Bit-Fließkommazahl 2^{32} Zahlen repräsentiert und folglich die Anzahl N an zu simulierenden Lebensgeschichten ein Vielfaches davon betragen müsste.

Daher erfolgt die Darstellung spektraler Größen in einer Simulation grundsätzlich gruppiert [66]. Folglich gilt für das Integral (43) der Übergang

$$I_E(E) \rightarrow \frac{1}{\Delta E_g} \int_{E_g}^{E_{g+1}} \int_{\Delta t} \int_{\Delta V} \int_{\Delta\Omega} d\Omega' dV' dt' dE' f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q') \zeta_{E\Omega}(q') \equiv I_E^g(E_g). \quad (46)$$

Die Wahl der Gruppenbreite

$$\Delta E_g = E_{g+1} - E_g \quad (47)$$

mit $g = 1, \dots, G$ erfolgt entsprechend der Problemstellung unter Beachtung der Konvergenz.

Eine Gruppierung erfolgt nicht nur bezüglich der Energie. Nicht-stationäre Systeme werden ebenfalls stationär für konkrete Zeitintervalle berechnet. Außerdem kann auch der Raum nicht kontinuierlich dargestellt werden. Daraus folgt, dass alle Schätzgrößen zusätzlich gemittelt über ein Volumen ΔV sind. Dies entspricht aber auch dem Verhalten von physikalischen Strahlungsdetektoren, welche einen Messeffekt immer gemittelt über ein Messvolumen erfassen [100].

Durch Vergleich von (42) mit (46) folgt für eine im Zeitraum Δt stationäre Problemstellung

$$\Phi_E^g(\Delta V, \Delta E_g) \equiv \frac{\Delta t}{\Delta V \cdot \Delta E_g} \int_{E_g}^{E_{g+1}} \int_{\Delta V} \int_{4\pi} d\Omega' dV' dE' \frac{\zeta_{E\Omega}(\vec{r}', E', \vec{\Omega}')}{\Sigma_t(\vec{r}, E')}. \quad (48)$$

Φ_E^g ist die über das Volumen ΔV und das Energieintervall ΔE_g gemittelte spektrale Fluenz. Die dazugehörige Monte Carlo Schätzfunktion lautet

$$\tilde{\Phi}_E^g = \frac{1}{\Delta V \cdot \Delta E_g \cdot N} \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=0}^{n(k)} \frac{w_i^k}{\Sigma_t(q_i^k)} \theta(q_i^k | \Delta V, \Delta E_g) \right). \quad (49)$$

Dieser Schätzer wird auch als Stoßpunktschätzer bezeichnet. Eine weiterer Fluenzschätzer ist der Spurlängenschätzer [96], welcher jedoch nicht im Strahlungstransportprogramm AMOS verwendet wird.

Eine weitaus wichtigere Größe, welche mittels Monte Carlo Methoden berechnet werden kann, stellt die deponierte Energie E_D dar. Spektral analysiert, mündet diese in die Impulshöhenverteilung und bezogen auf die Masse des Detektors folgt die Dosis. Beide Größen bilden die Grundlage der Dosimetrie und der Spektrometrie mit einer Vielzahl an Anwendungen [6, 9, 100].

Die Impulshöhenverteilung entspricht der Anzahl N_D^g an gemessenen Depositionen (Impulsen) im Energieintervall $[E_D^g, E_D^g + \Delta E_D^g]$ mit $g = 1, \dots, G$ geteilt durch die Intervallbreite ΔE_D^g und die Messzeit Δt ,

$$\varepsilon(\Delta E_D^g) = \frac{N_D^g}{\Delta E_D^g \Delta t}. \quad (50)$$

Ist die Zeitspanne zwischen dem Eintreffen von Teilchen im Detektor groß gegen die benötigte Zeit zur Analyse eines Impulses, repräsentiert jeder Eintrag die Summe aller Energiedepositionen eines einzelnen, den Detektor treffenden Teilchens. Dabei muss zusätzlich angenommen werden, dass die Zeitspanne, in der alle Wechselwirkungsprozesse des Primärteilchens und aller erzeugten Sekundärteilchen stattfinden, vernachlässigbar ist. Die Impulshöhenverteilung ist demnach ein Maß für die statistische Natur der Wechselwirkungsprozesse. Aus diesem Grund kann diese nicht durch mittlere wertsbezogene Strahlungsfeldgrößen dargestellt werden. Der dazugehörige Monte Carlo Detektor, der spektrale Energiedepositionsschätzer, wird daher auch als nicht-BOLTZMANN'scher Schätzer (engl. non-BOLTZMANN-Tally) bezeichnet [27].

Um eine formale Beschreibung des Schätzers für die Impulshöhenverteilung abzuleiten, kann das Integral I aus Gleichung (46) folglich nicht zu Grunde gelegt werden. Es ist jedoch möglich, für jede Lebensgeschichte innerhalb einer Monte Carlo Simulation die durch Ionisation und Kernreaktion im Detektorvolumen ΔV deponierte Energien von Primär- und allen erzeugten Sekundärteilchen zu \tilde{E}_D saldieren [96]. In einer analogen Simulation wird anschließend die Anzahl an Energiedepositionen im Energieintervall $[E_D^g, E_D^g + \Delta E_D^g]$ um eins erhöht, $\tilde{N}_D^g \rightarrow \tilde{N}_D^g + 1$. Das Ergebnis wird letztendlich durch die Anzahl N an Lebensgeschichten geteilt.

Bei einer nicht-analogen Simulation ist zusätzlich das Teilchengewicht zu berücksichtigen. In diesem Fall ist zu jedem Stoß die Summe \tilde{E}_D der bisher deponierten Energien, einschließlich sämtlicher Energiedepositionen aller erzeugten Sekundärteilchen, zu saldieren. Anschließend erfolgt eine Erhöhung von \tilde{N}_D^g um den Wert des Teilchengewichts [27], $\tilde{N}_D^g \rightarrow \tilde{N}_D^g + w_i^k$. Formal ergibt sich

$$\tilde{\varepsilon}(\Delta E_D^g) = \frac{\tilde{N}_D^g}{\Delta E_D^g} = \frac{1}{\Delta E_D^g \cdot N} \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=0}^{n(k)} w_i^k \cdot \theta(q_i^k | \Delta V; \tilde{E}_D | \Delta E_D^g) \right). \quad (51)$$

Die beiden hier angegebenen Schätzer werden unmittelbar durch die Teilchengewichte bestimmt. Dies gilt insbesondere für deren Standardunsicherheiten, welche entsprechend Gleichung (35) abgeleitet werden können. Folglich ist es möglich, die Standardunsicherheit durch gezielte Veränderung der Teilchengewichte zu verkleinern. Dabei darf es jedoch zu keiner signifikanten Veränderung der Schätzergebnisse kommen. Gewichtsverändernde Techniken, die diese Anforderungen erfüllen, stehen im Fokus von effizienzsteigernden Methoden.

2.3 Effizienzsteigernde Methoden

Wenn für ein gegebenes Strahlungstransportproblem die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen den Detektor erreicht, sehr klein ist, so erweist sich die Lösung mittels analoger Monte Carlo Methoden als ineffizient [16]. Ein Großteil der Rechenzeit wird für die Simulation von Lebensgeschichten verwendet, die keinen Beitrag zum gewünschten Ergebnis liefern. Dies kann sogar dazu führen, dass kein Ergebnis innerhalb eines wirtschaftlichen Zeitraums berechnet werden kann.

In diesem Fall ist die Verwendung von effizienzsteigernden Methoden wünschenswert. Zum einen können weitergehende Quell- und Geometrievereinfachungen zur Einsparung von Rechenzeit führen. Durch die Modifikationen kann jedoch das Ergebnis verändert werden. Die Signifikanz dieser Veränderung hängt aber von der jeweiligen Problemstellung ab und muss im Einzelfall geprüft werden.

Zum anderen können nicht-analoge Monte Carlo Methoden verwendet werden. Dazu müssen die durch die Strahlungstransportgleichung BOLTZMANN'schen Typs (20) vorgegebenen physikalischen Modelle so verändert werden, dass die Berechnung für das Ergebnis unwichtiger Lebensgeschichten frühzeitig abgebrochen oder sogar vermieden wird. Jedoch darf dabei die Erwartungstreue des gewünschten Schätzers nicht gestört werden.

Zu den bekanntesten nicht-analogen Methoden gehören weitergehende Vereinfachungen in der Geometrie, Quellanpassung, Importance Sampling, Correlated Sampling, Teilchensplitting, Russisch Roulette, Gewichtsfenstertechnik, Exponentialtransformation, implizite Absorption, erzwungene Wechselwirkung und adjungierter Transport [12, 16, 67, 96, 101–103]. Implizite Absorption wurde in dieser Arbeit bereits bei der Beschreibung von Teilchenlebensgeschichten eingeführt. Der Fokus liegt auf der Beschreibung der Gewichtsfenstertechnik mit einem dazu gehörigen Generator.

Ein Vergleich der Wirkung effizienzsteigernder Methoden zwischen verschiedenen Strahlungstransportprogrammen ist nicht möglich, da deren Erfolg insbesondere von der eingesparten Rechenzeit abhängt. Diese wird jedoch auch noch von vielen anderen Faktoren bestimmt. Dazu gehören die Art und Weise der Implementation, die verwendeten Programmiersprache sowie die Compilereinstellungen. Es ist im Allgemeinen nicht möglich, den Einfluss dieser Faktoren auf die Simulationszeit genau einzuschätzen.

2.3.1 FOM

Die Effizienz einer Simulation wird durch zwei Faktoren beeinflusst: die benötigte Rechenzeit und die Genauigkeit des Ergebnisses. Um die Effizienz zu steigern, kann einerseits die mittlere Rechenzeit für die Simulation einer Lebensgeschichte durch Verbesserung vorhandener Algorithmen verringert werden. Andererseits kann die Verteilung der erzeugten Stichproben so verändert werden, dass die Differenz $\tilde{I}^2 - \bar{I}^2$ in der Standardunsicherheit $\Delta\tilde{I}$,

$$\Delta\tilde{I} = \sqrt{\frac{1}{N-1}(\tilde{I}^2 - \bar{I}^2)} , \quad (52)$$

des Schätzers \tilde{I} verringert wird. In diesem Fall kann die gleiche Standardunsicherheit mit einer geringeren Anzahl N an Lebensgeschichten erreicht werden. Dies wird allgemein als Varianzreduktion bezeichnet [16, 67, 96, 101].

Eine geeignete Größe zur Charakterisierung der Effizienz ist die sogenannte „Figure of Merit“, kurz FOM. Diese ist entsprechend

$$FOM = \left(\frac{(\Delta\tilde{I})^2}{\tilde{I}^2} \cdot \tilde{T} \right)^{-1} , \quad (53)$$

definiert [96]. Die FOM ist der Kehrwert des Produktes aus dem Quadrat der relativen Standardunsicherheit von \tilde{I} und der gemessenen Rechenzeit \tilde{T} zur Simulation von N Lebensgeschichten. \tilde{T} kann auch als Schätzfunktion nach

$$\tilde{T} = \tilde{T}(T_1, \dots, T_N) = \sum_{i=1}^N T_i \quad (54)$$

aufgefasst werden. Hierbei ist T_1, \dots, T_N Stichprobe vom Umfang N für die Rechenzeit zur Simulation einer Lebensgeschichte. Mit

$$\bar{T} = \bar{T}(T_1, \dots, T_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N T_i = \frac{1}{N} \cdot \tilde{T} \quad (55)$$

wird außerdem ein erwartungstreuer Schätzer für die mittlere Rechenzeit der Simulation einer Lebensgeschichte definiert.

Die Verwendung der FOM bzw. dessen Kehrwert zur Quantifizierung der Effizienz einer Simulation ist weit verbreitet [16, 18, 23, 35, 75, 96, 101, 104–106] und wird daher auch in dieser Arbeit verwendet.

Der Vorteil in dieser Definition wird ersichtlich, wenn (52), (54) und (55) in (53) eingesetzt werden und $N \gg 1$ angenommen wird. Dann ergibt sich für die FOM

$$FOM = \left(\frac{1}{N-1} \left(\frac{\tilde{I}^2}{\bar{I}^2} - 1 \right) \cdot N \cdot \bar{T} \right)^{-1} \xrightarrow{N \gg 1} \left(\left(\frac{\tilde{I}^2}{\bar{I}^2} - 1 \right) \cdot \bar{T} \right)^{-1}. \quad (56)$$

Die FOM ist für große Werte von N folglich unabhängig von der Anzahl der berechneten Lebensgeschichten. Da N typischerweise im Bereich zwischen 10^6 und 10^{10} liegt, ist dies gegeben.

Die beiden Faktoren Standardunsicherheit und Rechenzeit zeigen, dass eine varianzreduzierende Technik nicht zwangsläufig auch effizienzsteigernd wirkt. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn die Rechenzeit durch den unangebrachten Einsatz der Technik viel stärker vergrößert wird, als die relative Standardunsicherheit reduziert. Folglich ist vor der Anwendung genau zu überprüfen, ob eine varianzreduzierende Technik für die jeweilige Problemstellung geeignet ist.

2.3.2 Quell- und Geometrievereinfachungen

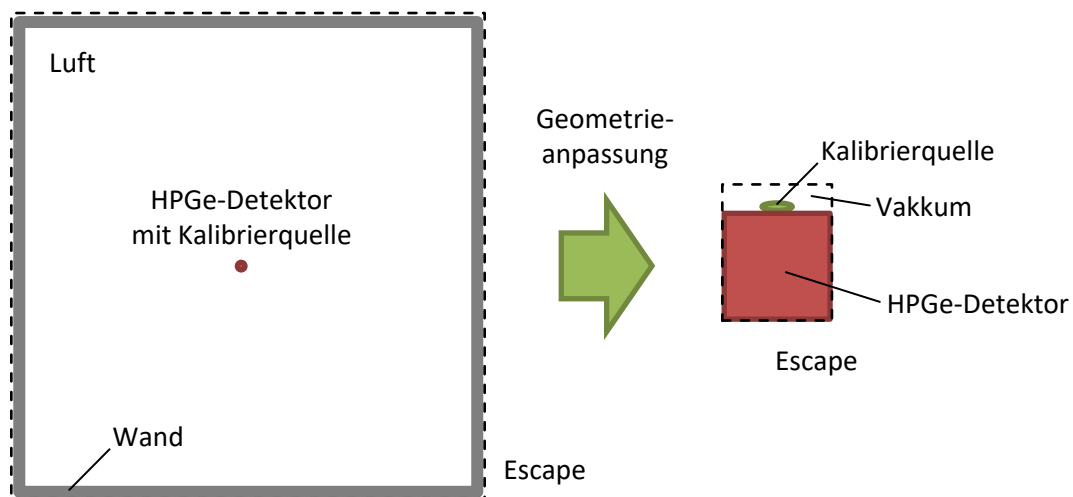


Abbildung 7: Geometrieanpassung für die Simulation einer Kalibrierungsmessung mit Photonenstrahlung

Die Modellierung der Geometrie, in welcher das Strahlungstransportproblem betrachtet wird, beeinflusst die Vergleichbarkeit zwischen Simulation und physikalische Realität. Je besser die Geometrie den Vorgaben folgt, umso genauer wird das Ergebnis. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, welche Signifikanz bestimmte Geometriebereiche und Materialzusammensetzungen bezüglich der zu schätzenden Größen haben. Jede Geometrieänderung ist daher stark problemabhängig, beeinflusst jedoch auch die Effizienz. Je kleiner die Geometrie im Vergleich zur mittleren freien Weglänge der zu simulierenden Teilchen in den verwendeten Materialien ist, desto weniger Rechenzeit wird benötigt.

Beispielsweise kann bei der Charakterisierung des Vollenergieansprechvermögens für Photonenstrahlung mit Kalibrierquellen eines frei im Raum stehenden HPGe-Detektors die Modellierung der Wände vernachlässigt werden, wenn die Rückstreuung aus der Wand nur mit geringer Wahrscheinlichkeit möglich ist. Dadurch wird die Ausdehnung der Geometrie stark verkleinert, was Simulationszeit einspart.

Ein weiterer Schritt ist die Überführung von Luft in Vakuum, da deren Schwächungskoeffizient etwa drei Größenordnungen kleiner ist, als der in Flüssigkeiten oder Feststoffen. Diese Schritte sind in Abbildung 7 veranschaulicht. Ist jedoch eine möglichst genaue Berechnung des gesamten Spektrums von Interesse, so müssen sowohl Wände als auch Luft berücksichtigt werden.

Eine weitere Möglichkeit zur Steigerung der Effizienz ist die anwenderseitige Veränderung der Quelle. Dazu gehören die Emissionsrichtung, das Emissionsspektrum und die Quellausdehnung [103]. Dies ist anhand eines Beispiels in Abbildung 8 veranschaulicht.

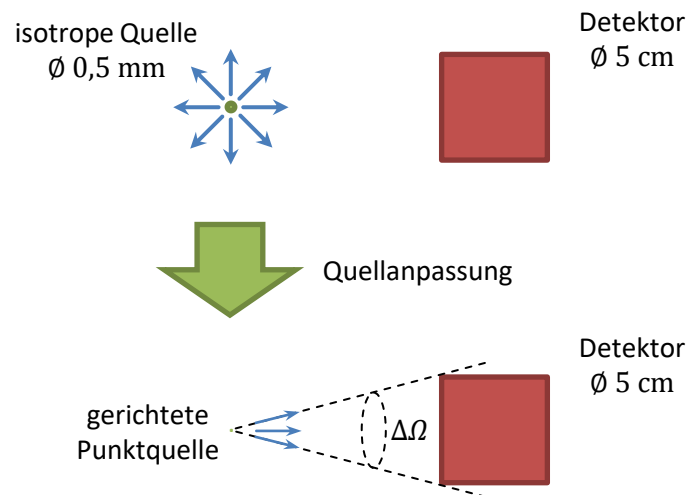


Abbildung 8: Quellanpassung für die Simulation einer Kalibrierungsmessung mit Photonenstrahlung

Zur Kalibrierung eines energiedispersiven Photonendetektors werden Nuklidquellen mit vergleichsweise geringer Aktivität verwendet. Das aktive Material ist hierbei in einem kugelförmigen Hohlraum eines dünnen Plastikchips untergebracht. Der Hohlraum hat einen Durchmesser von etwa einem Millimeter. Damit ist die Quellausdehnung sehr viel kleiner als der Detektordurchmesser. Anstatt eine homogene, kugelförmige Quellverteilung zu simulieren, wird die Quelle punktförmig dargestellt. Dadurch ist der Emissionsort exakt festgelegt. Für Photonenenergien oberhalb von 10 keV können außerdem Streuprozesse im Plastikchip vernachlässigt werden, sodass auch die Plastikhülle nicht simuliert werden muss.

Die Photonenrichtungsverteilung einer Kalibrierquelle kann im Allgemeinen als isotrop in alle Raumrichtungen, Emissionsraumwinkel $\Omega_E = 4\pi$, angenommen werden. Sind Detektor und Quelle nur von Luft umgeben, so sind Streuprozesse gegebenenfalls auch in diesem Medium vernachlässigbar. In diesem Fall kann die Emission auf Richtungen, welche direkt auf die Detektoroberfläche zeigen, beschränkt werden. Die isotrope Quelle wird somit zu einer gerichteten Aperturquelle. Der Emissionsraumwinkel beträgt nur noch $\Omega_E = \Delta\Omega$. Aufgrund der Normierung auf die Quellteilchenzahl, wird das Ergebnis verfälscht. Zur Korrektur kann in diesem Beispiel das Startgewicht w_0 mit dem Faktor $\Delta\Omega/4\pi$ multipliziert werden.

Des Weiteren sind nur die wahrscheinlichsten Photonenemissionen der zur Kalibrierung verwendeten Nuklidquellen von Interesse. Folglich können Quellphotonen mit geringer Emissionswahrscheinlichkeit und alle β -, AUGER- und Konversionselektronen vernachlässigt werden. Die Energieverteilung ist somit diskret und kann effizient simuliert werden.

2.3.3 Importance Sampling

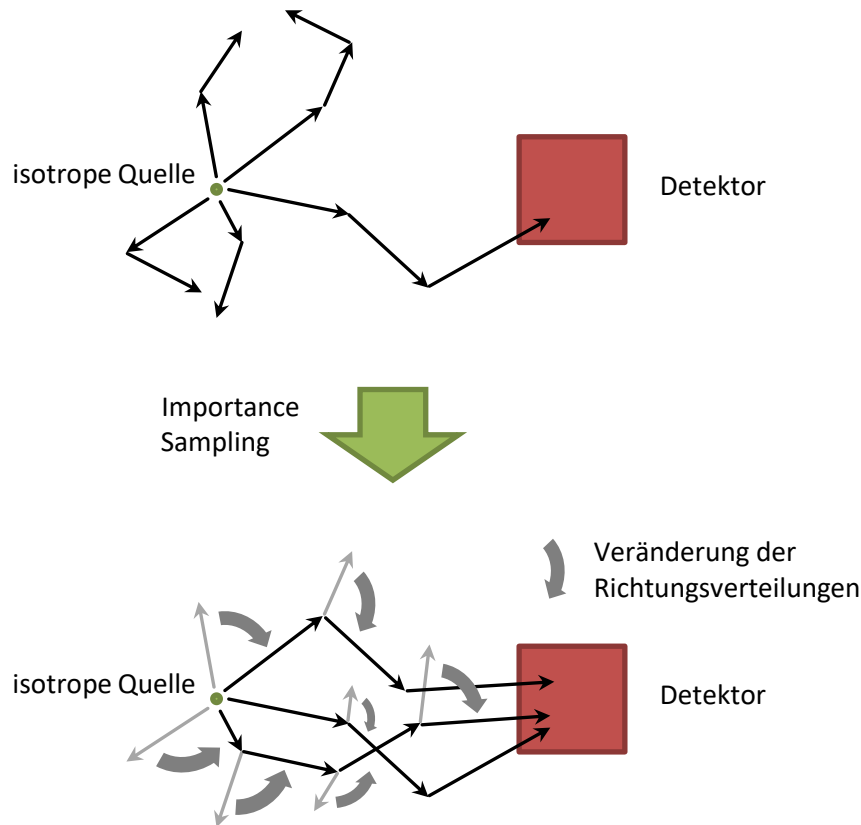


Abbildung 9: Veränderung des zufälligen Lebenswegs eines Teilchens durch Importance Sampling

Eine grundlegende Methode zur Verbesserung der Effizienz vorwärts gerichteter Simulationen ist das Importance Sampling [16, 17, 101, 102, 107–111]. Bei dieser Methode wird die Erzeugung von Stichproben (engl. Sampling) so beeinflusst, dass eine Konvergenz des zu berechnenden Ergebnisses mit Hilfe eines möglichst geringen Stichprobenumfangs erreicht wird. Dies ist gleichbedeutend mit einer Minimierung der Standardunsicherheit des Schätzers. Dazu sollen Lebensgeschichten mit einer hohen Bedeutung (engl. Importance), das heißt mit einem großen Beitrag zum Schätzer, durch gezielte Stichprobenerhebung bevorzugt werden. Veranschaulicht sollen die Teilchen zum Detektor hin getrieben werden. Dies ist in Abbildung 9 dargestellt. Dieses Ziel kann durch Transformation der zu Grunde liegenden Verteilung erreicht werden.

Für die Quelle ist es möglich, durch Veränderungen der Emissionsrichtungsverteilung eine größere Anzahl Teilchen in Richtung des Detektors zu emittieren. Um eine Ergebnisverfälschung zu vermeiden, kann das Startgewicht w_0 bei der Emission richtungsabhängig verändert werden. Raumrichtungen mit höherer Emissionswahrscheinlichkeit erhalten ein entsprechend geringeres Startgewicht.

Beim Transport ist es möglich, den wechselwirkungsfreien Weg richtungsabhängig zu verändern. Bewegungsrichtungen in Richtung des Detektors erhalten eine größere mittlere freie Weglänge. Dadurch können die Teilchen den Detektor mit einer geringeren Anzahl an Transportschritten erreichen, was Rechenzeit einspart. Diese Technik wird als Exponentialtransformation bezeichnet. Eine Korrektur erfolgt mit Hilfe des Teilchengewichts. Unterliegen Teilchen einer Streuung, so kann die Emissionsrichtungsverteilung hinsichtlich einer Bevorzugung der Streuung in Richtung Detektor verändert werden. Auch hier muss die Veränderung des Ergebnisses durch eine Anpassung der Teilchengewichte korrigiert werden.

Formal werden mittels Importance Sampling die Kerne des Transport- und Stoßintegraloperators der integralen Strahlungstransportgleichung, der Stoßteilchendichtegleichung (21), durch Einführung einer Transformationsfunktion verändert. Diese Transformationsfunktion wird als Importance-Funktion bezeichnet. Im Anhang B ist ausführlich dargestellt, wie sich die Strahlungstransportgleichung dadurch verändert.

Die zur Transformation verwendete Importance-Funktion beeinflusst die Standardunsicherheit der zu schätzenden Größe [110], Anhang B. Formal kann sogar ein Wert von null erreicht werden. Dies ist jedoch nur mit Kenntnis des Ergebnisses möglich und daher nicht praktisch. Es zeigt jedoch, dass eine sehr effiziente Monte Carlo Methode durch eine geschickte Wahl der Importance-Funktion erreicht werden kann [17]. Wird diese schlecht gewählt, so kann die Effizienz der Monte Carlo Methode mit Importance Sampling sogar kleiner sein, als ohne. Folglich erfordert die Anwendung viel Erfahrung.

R.R. COVEYOU, V.R. CAIN und K.J. YOST zeigen in [109], dass unter Verwendung des Teilchenwerts $\zeta_{E\Omega}^*$ eine nahezu optimale Importance-Funktion abgeleitet werden kann. Dies ist im Anhang B dargestellt. $\zeta_{E\Omega}^*$ ist hierbei die zentrale Größe der adjungierten Strahlungstransportgleichung. Diese ist im Anhang C und beispielsweise in [112] und [113] beschrieben. Während die bisher betrachtete Form des Strahlungstransports als vorwärts gerichtet beschrieben werden kann, ist die Lebensgeschichte eines adjungierten Teilchens zeitlich rückwärts gerichtet. Es wird vom Detektor emittiert und in der Quelle detektiert. Aus diesem Grund wird der Teilchenwert $\zeta_{E\Omega}^*$ auch als adjungierte Stoßteilchendichte bezeichnet. Diese Simulationsform ist besonders in Geometrien geeignet, in denen der Detektor ein viel kleineres Volumen als die Quelle besitzt.

Durch den Einsatz des Teilchenwerts $\zeta_{E\Omega}^*(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ als Importance-Funktion folgt die Forderung

$$w \propto \frac{1}{\zeta_{E\Omega}^*(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})} \quad (57)$$

für die Teilchengewichte w . Eine optimale Monte Carlo Simulation wird folglich erreicht, wenn die Teilchengewichte am Punkt $(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ so verändert werden, dass sie indirekt proportional zum Teilchenwert $\zeta_{E\Omega}^*(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ sind. Ein Werkzeug zur Anpassung der Teilchengewichte entsprechend der Forderung (57) ist mit der Gewichtsfenstertechnik gegeben.

Es muss bemerkt werden, dass auch der Teilchenwert a priori nicht bekannt ist und erst berechnet werden müsste. Bei genauer Kenntnis dieser adjungierten Größe ist jedoch bereits das Problem gelöst. Da umgekehrt für die adjungierte Monte Carlo Methode mit Importance Sampling die Stoßteilchendichte $\zeta_{E\Omega}$ zu einer nahezu optimalen Importance-Funktion führt [101], folgt die Möglichkeit eines iterativen Algorithmus zur Berechnung einer geeigneten Importance-Funktion. Vorwärts gerichtete und adjungierte Importance-Funktion werden dabei abwechselnd über einen vergleichsweise geringen Umfang an Stichproben für Lebensgeschichten berechnet und so sukzessive verbessert. Dies sorgt für eine effizientere Lösung des gegebenen Problems mit Monte Carlo Methoden.

2.3.4 Gewichtungsfenstertechnik

Die zentrale effizienzsteigernde Methode in dieser Arbeit ist die Gewichtungsfenstertechnik, welche die Methoden Russisch-Roulette und Teilchensplitting vereinigt. Erstmalig wurde dieser Begriff 1981 von der Los Alamos Monte Carlo Group des Los Alamos National Laboratory [23, 108] verwendet. Methodik und Name für Russisch-Roulette und Teilchensplitting gehen jedoch auf J. VON NEUMANN und S. ULAM, Anfang der 1950er Jahre zurück [17].

Der Einsatz dieser Techniken soll dafür sorgen, dass Lebensgeschichten, bei denen die Wahrscheinlichkeit des Erreichens des Detektors oder der Detektorbeitrag sehr gering sind, frühzeitig durch Russisch-Roulette abgebrochen werden. Für Lebensgeschichten, bei denen diese Wahrscheinlichkeit oder der Beitrag hingegen groß sind, soll die Chance auf das Erreichen des Detektors durch Teilchensplitting noch weiter vergrößert werden. Die beim Transport und beim Stoß zu Grunde liegenden physikalischen Modelle bleiben dabei unverändert.

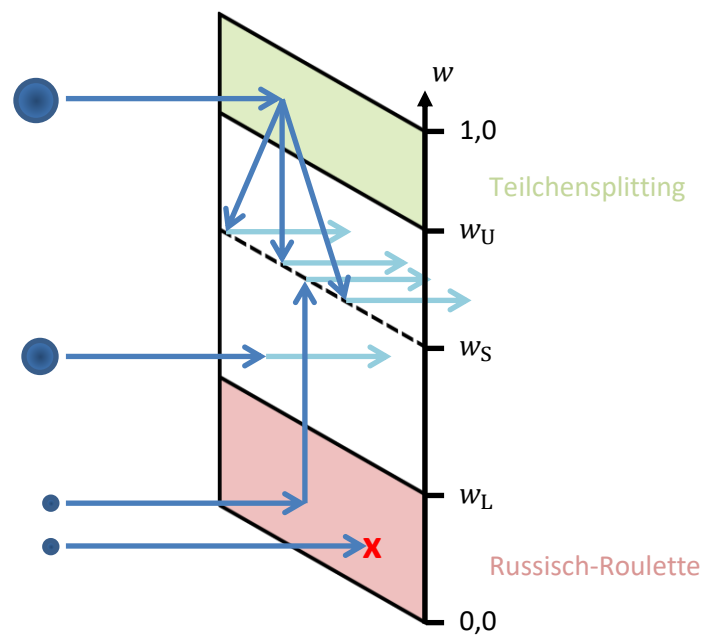


Abbildung 10: Prinzip der Gewichtungsfenstertechnik (nach den Abbildungen 2-23 und 2-24 in [96])

Das Prinzip der Gewichtsfensterstechnik ist in Abbildung 10 veranschaulicht. Ein Gewichtsfenster ist durch eine obere, w_U (engl.: upper weight), und eine untere Gewichtsgrenze, w_L (engl.: lower weight), definiert. Zwischen diesen liegt das sogenannte Überlebensgewicht, w_S (engl.: survival weight). Es gilt

$$w_L < w_S < w_U . \quad (58)$$

Die Gewichtsfensterstechnik wird zur Kontrolle des Teilchengewichts w verwendet. Wenn $w < w_L$, wird Russisch-Roulette gespielt, wobei das Teilchen mit der Wahrscheinlichkeit p_S überlebt. Andernfalls wird die Simulation der Lebensgeschichte beendet. p_S hängt hierbei vom Teilchengewicht w und dem Überlebensgewicht w_S ab [67, 96],

$$p_S = \frac{w}{w_S} . \quad (59)$$

Ist hingegen $w > w_U$, so wird Teilchensplitting durchgeführt. Dabei wird das Teilchen in n identische Fragmente mit Gewicht w/n geteilt. Die Anzahl n richtet sich nach dem Zielgewicht, für welches $w_L \leq w/n \leq w_U$ gilt. Als Zielgewicht kann aber auch ein festes Gewicht zwischen w_L und w_U , zum Beispiel das Überlebensgewicht w_S , gewählt werden. Dann wäre n jedoch nicht ganzzahlig. Als Ausweg wird zunächst die größte ganze Zahl kleiner oder gleich w/w_S bestimmt,

$$n = \max \left\{ m \in \mathbb{N} \mid m \leq \frac{w}{w_S} \right\} . \quad (60)$$

Anschließend wird mit Hilfe einer gleichverteilten Stichprobe ξ im Fall

$$\xi < \frac{w}{w_S} - n \quad (61)$$

n um eins erhöht. Der Erwartungswert für n ist dann w/w_S .

Wahl der Gewichtsfenstergrenzen

Eine große Schwierigkeit besteht darin, die Gewichtsfenstergrenzen für eine größtmögliche Steigerung der Effizienz in Abhängigkeit einer Phasenraumvariable zu setzen [23, 73, 79]. Für einfache Geometrien, wie beim Problem der tiefen Durchdringung, kann die Ortsabhängigkeit der Gewichtsfenster analytisch approximiert werden [16]. In komplexeren Aufgabenstellungen mit zusätzlicher Energie- und Richtungsabhängigkeit ist dies im Allgemeinen nicht möglich.

Einen allgemeinen Ansatz bietet die Methode Importance Sampling in Kombination mit der adjungierten Transportgleichung. Durch den Einsatz des Teilchenwerts $\zeta_{E\Omega}^*(q)$ mit $q = (\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ bzw. der adjungierten Stoßteilchendichte als Importance-Funktion folgt die Beziehung (57),

$$w = \frac{\lambda}{\zeta_{E\Omega}^*(q)} , \quad (62)$$

zwischen dem Teilchengewicht w und $\zeta_{E\Omega}^*(q)$ mit einem nicht näher bestimmten Proportionalitätsfaktor λ . Die Wahl von $\zeta_{E\Omega}^*(q)$ als Importance-Funktion ist hierbei nahezu optimal in Hinblick auf die Reduktion der Varianz. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass sich eine nahezu optimale Wahl der Gewichtsfenster ebenfalls an dem Verlauf der adjungierten Größe Teilchenwert orientiert [73, 79]. Die Gewichtsfenstertechnik ist in diesem Fall die Realisierung von Importance Sampling.

Bei diesem Vorgehen bleibt allerdings die Freiheit in der Wahl des Proportionalitätsfaktors λ , da dessen wahrer Wert nicht bekannt ist. Von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS wird daher empfohlen, diesen Faktor so zu wählen, dass das Quellgewicht innerhalb der Fenstergrenzen liegt [23].

Durch die Forderung (62) ist zunächst nur einer der Parameter w_U , w_S und w_L der Gewichtsfenstertechnik festgelegt.

Im Rahmen dieser Arbeit gilt

$$w_S = w_S(q) = \frac{\lambda}{\zeta_{E\Omega}^*(q)}. \quad (63)$$

Wie die übrigen zu setzen sind, wird ebenfalls von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS in [23] als Empfehlung angegeben. Demnach sollte die Beziehung

$$w_U \approx 5 \cdot w_L \quad (64)$$

erfüllt sein, wobei die Wahl des Faktors nur einen geringen Einfluss hat. Über die Lage des Überlebensgewichts w_S innerhalb des Fensters wird jedoch keine Aussage getroffen. Im Rahmen dieser Arbeit werden

$$w_U = 2 \cdot w_S \quad (65)$$

und

$$w_L = 0,5 \cdot w_S \quad (66)$$

festgelegt. Die gewählten Faktoren orientieren sich dabei an der binären Arithmetik eines Computersystems.

Mit der geforderten indirekten Proportionalität der Gewichte zum Teilchenwert ist eine Vorschrift zum Setzen der Gewichtsfenster definiert. Während die Ortsabhängigkeit für einfache Beispiele, wie der tiefen Durchdringung, a priori berechnet werden kann, ist schon die Wahl passender Gewichtsfenstergrenzen in Abhängigkeit von Ort \vec{r} und Teilchenenergie E auch für erfahrene Benutzer im Allgemeinen nahezu unmöglich [23, 79]. Ein Automatismus zum Berechnen der Grenzen ist demnach wünschenswert.

Basierend auf der Schätzung des Teilchenwerts wurden bereits verschiedene Techniken zur Schätzung der Gewichtsfenster entwickelt [16, 23, 72, 74–77, 96]. Dabei gilt die Forderung, dass die benötigte Rechenzeit zur Berechnung der Parameter und zur Durchführung der nicht-analogen Monte Carlo Methode geringer ist, als die Rechenzeit für entsprechende analoge Simulationen.

Eine Möglichkeit besteht in der analytischen Berechnung, basierend auf vereinfachten Transportmodellen. Dabei wird zunächst eine Darstellung des zweiten Moments der Beiträge einer Lebensgeschichte zum Schätzer in Abhängigkeit der gesuchten Parameter gewonnen. Anschließend wird dieses unter Variation der Parameter minimiert, wodurch auch die Standardunsicherheit des Schätzers minimiert wird. Dieser Ansatz wird „Direct Statistical Approach“ genannt und geht auf A. DUBI et al. [114] zurück. Gegebenenfalls werden die Ergebnisse im Nachhinein mit kurzen Simulationen verbessert.

Weiterhin können die gewünschten Parameter auch durch deterministische Methoden berechnet werden [28, 36, 38, 78]. In der Methode der diskreten Ordinate werden der Phasenraum diskretisiert und eine Lösung mittels Finite-Element-Methode berechnet. Dieses Vorgehen ist unter anderem in den Programmpaket AVATAR [78] und A³MCNP [72] implementiert.

Ein gänzlich anderer Ansatz ist die Berechnung der Parameter mittels der adjungierten Beschreibung von Strahlungsausbreitung als Diffusion, welcher im Strahlungstransportprogramm MCBEND [57] umgesetzt ist.

Den direktesten Zugang liefern jedoch adjungierte, vorwärts gerichtete oder kombinierte (vorwärts-adjungierte) Monte Carlo Methoden. Hierbei werden die Parameter durch Schätzung des Teilchenwerts $\zeta_{E,\Omega}^*(q)$ in kurzen Simulationen approximiert, welche gegebenenfalls auf vereinfachten Transportmodelle beruhen. Die dazugehörigen Algorithmen gehen auf T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS vom Los Alamos National Laboratory zurück und werden als Gewichtsfenstergeneratoren bezeichnet [23, 79, 80].

Zu diesen gehört auch der sogenannte vorwärts-adjungierte Generator (auch als „Importance-Generator“ bezeichnet) von T.E. BOOTH [23, 79], welcher im Strahlungstransportprogramm MCNP [96] implementiert ist. Da Monte Carlo Methoden die allgemeinste Methode zur Lösung von Transportproblemen darstellen [16] und dieser Generator auf denselben basiert, dienen dieser bei allen anderen Verfahren zur Evaluation der Ergebnisse. Für einige Problemstellungen ist mit dem Importance-Generator die einzige praktische Möglichkeit gegeben, eine akkurate Lösung zu erhalten [32]. Aus diesem Grund wird dieser Generatortyp im Rahmen dieser Arbeit weiterentwickelt und im Strahlungstransportprogramm AMOS implementiert.

Nicht-BOLTZMANN'sche Schätzer

Die Gewichtsfenstertechnik ist erwartungstreu, da sowohl Teilchensplitting als auch Russisch-Roulette erwartungstreu sind [67]. Die Erwartungstreue gilt bezüglich des Erwartungswerts der Verteilung der Teilchengewichte w_i der Streuordnungen i und damit nur für BOLTZMANN'sche Schätzer [27]. Insbesondere beim Energiedepositionsschätzer können die Fragmente aus dem unphysikalischen Prozess Teilchensplitting zusätzlichen Energiedepositionen erzeugen, was zu einer Veränderung des Spektrums führt.

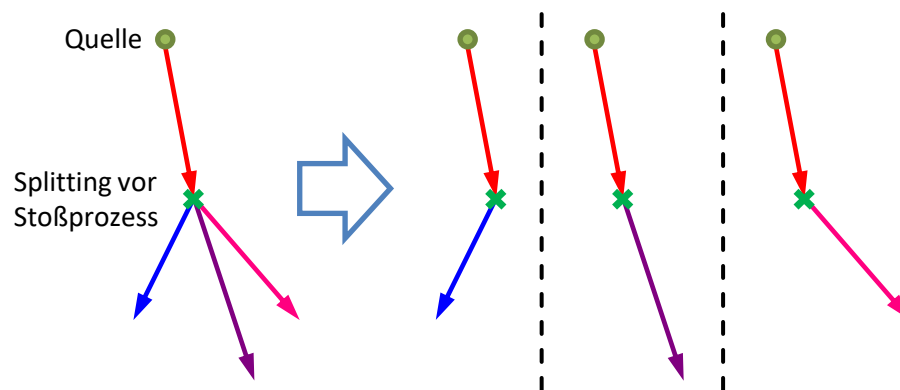


Abbildung 11: Veranschaulichung der Dekonvolutionsmethode

Ein Ausweg bietet ein von T.E. BOOTH entwickelter Ansatz, genannt Dekonvolutionsmethode [27, 37]. Mit diesem besteht auch die Möglichkeit, andere effizienzsteigernde Methoden für nicht-BOLTZMANN'sche Schätzer zu realisieren [115]. Anstatt die Fragmente als Sekundärteilchen zu betrachten, bildet jedes Fragment eine eigenständige Fortsetzung der bisherigen Lebensgeschichte. Dies ist in Abbildung 11 veranschaulicht. Auf diese Weise beziehen sich alle Detektorbeiträge, welche durch ein einziges Quellteilchen verursacht werden, auf mehrere Realisierungen einer Lebensgeschichte.

Vorteilig ist, dass sich lediglich die Berechnung des Schätzers verändert, nicht aber die Simulation des Lebensweges. Für diese Berechnung besteht jedoch ein größerer Bedarf an Speicherplatz, da für jedes Fragment die Information gespeichert werden muss, von welchem Teil der primären Lebensgeschichte dieses abstammt und welche Sekundärteilchen es erzeugt hat.

Weitere Ansätze sind die Methode des korrigierten Einzelteilchens („corrected single particle approach“) und die Supertrackmethode („supertrack approach“) [27]. Erstere Methode geht davon aus, dass Energiedepositionen im Detektor nur sehr selten stattfinden. Daher wird jede Energiedeposition einzeln registriert und im Spektrum eingetragen, ohne vorherige zu beachten. Dieser Fehler wird dadurch korrigiert, dass vereinzelte zufällig ausgewählte Lebensgeschichten mit der Dekonvolutionsmethode analysiert werden. Der Unterschied zwischen diesen beiden Ergebnissen wird dann gewichtet zum ersten addiert. Das Gewicht ist der Anteil q an mittels Dekonvolutionsmethode analysierter Lebensgeschichten. Dieses Verfahren ist erwartungstreu, was von T.E. BOOTH in [27] gezeigt wird.

Da die Dekonvolutionsmethode innerhalb der Methode des korrigierten Einzelteilchens nur selten durchgeführt wird, benötigt diese Technik weniger Speicherplatz und weniger Rechenzeit zur Auswertung. Andererseits ist mit dem Anteil q ein zusätzlicher a priori unbekannter Parameter gegeben, der problemabhängig die Effizienz der Methode beeinflusst.

Die Supertrackmethode hingegen basiert auf einer Modifikation des Transportalgorithmus. Die Lebensgeschichte des Primärteilchen und aller Sekundärteilchen wird als ein sogenannter Supertrack zusammengefasst. Durch Splitting wird nicht eine einzelne Lebensgeschichte aufgeteilt, sondern der Supertrack. Erfolgreiches Russisch Roulette hingegen beendet den Supertrack. Teilchengewichte werden daher den Supertracks zugeordnet, nicht mehr den einzelnen Teilchen. Folglich muss auch implizite Absorption neu definiert und auf den Supertrack übertragen werden. Außerdem sind weitgehende Veränderungen in Transport- und Stoßprozess durchzuführen, wodurch die Monte Carlo Simulation abstrakt und schwerer verständlich wird.

Wirkung der Gewichtsfenster

Die Gewichtsfenstertechnik wird in der Literatur unter der Rubrik Varianzreduktion geführt [23, 96, 108]. Eine verringerte Varianz wird hauptsächlich durch Teilchensplitting erzielt. Durch jede Verkleinerung der oberen Gewichtsgrenze um eine Größenordnung wird auch die größtmögliche Standardabweichung der Gewichtsverteilung um eine Größenordnung verringert. Im Gegensatz dazu verschmälert eine Vergrößerung der unteren Grenze um eine Größenordnung die Streubreite um ein Zehntel.

Eine Varianzreduktion bedeutet hier jedoch nicht zwangsläufig eine Steigerung der Effizienz. Teilchensplitting erhöht die Rechenzeit durch Erzeugung zusätzlicher Teilchen in einer Lebensgeschichte. Erst durch den Einsatz von Russisch-Roulette wird für eine Einsparung von Rechenzeit durch die vorzeitige Beendigung von unbedeutenden Lebensgeschichten gesorgt.

Wird der Forderung nach inverser Proportionalität zum Teilchenwert streng gefolgt und gleichzeitig darauf geachtet, dass das Quellteilchengewicht innerhalb eines Fensters liegt, können prinzipiell auch Gewichtsfenster oberhalb von $w = 1,0$ entstehen. Dadurch kann es sogar zu einer Vergrößerung der Varianz kommen. Wenn jedoch die Rechenzeit der Simulation durch Russisch Roulette insgesamt verkleinert wird, ist dies akzeptabel. Die Gewichtsfenstergrenzen müssen letztendlich so gewählt werden, dass ein Effizienzgewinn resultiert. Das folgende Beispiel verdeutlicht dies. In Abbildung 12 ist die dazugehörige Geometrie skizziert.

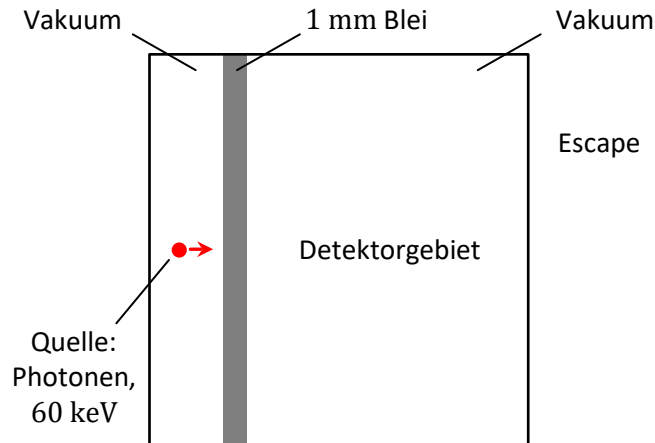


Abbildung 12: Geometrie eines Simulationsbeispiels zur Demonstration der Wirkung der Gewichtsfenstertechnik

Die Nadelstrahlquelle emittiert die wahrscheinlichste Photonenlinie von ^{241}Am mit der Energie 60 keV in Richtung einer 1 mm dicken Bleiabschirmung. Hinter der Abschirmung wird die spektrale Fluenz Φ_E im Vakuum geschätzt. Die nicht-analoge Simulation mit impliziter Absorption wird mit und ohne Gewichtsfenstertechnik durchgeführt.

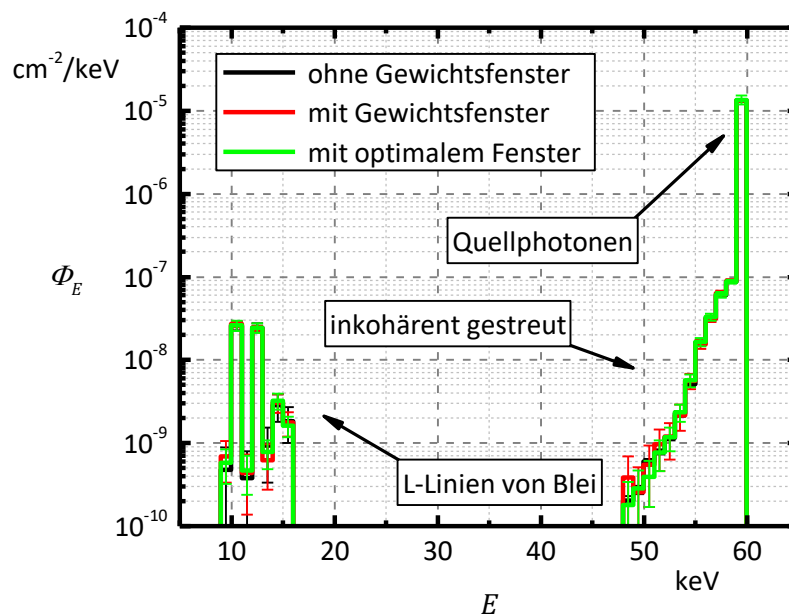


Abbildung 13: Spektrale Fluenz Φ_E im Vakuum hinter der Bleiabschirmung aus der Geometrie in Abbildung 12 (68,27% Vertrauensbereich)

Die Ergebnisse sind in Abbildung 13 dargestellt. Sie stimmen im Rahmen ihrer Standardunsicherheit überein. Der größte spektrale Beitrag kommt von Photonen der Maximalenergie. Sie bilden den Peak bei 60 keV. Das sich anschließende, stark abfallende Kontinuum wird durch ein- und mehrfach inko-

härent gestreute Photonen gebildet. Im Bereich zwischen 10 keV und 15 keV sind die als Sekundärteilchen erzeugten Röntgenemissionen aus den L-Übergängen [116] in Blei zu erkennen. Der Einfluss der Gewichtsfenstertechnik wird bei Betrachtung der gewichtsbezogenen Fluenz

$$\Phi_w = \frac{d\Phi}{dw} = \int_0^{E_{\max}} \Phi_{Ew}(\vec{r}, E, w) dE \quad (67)$$

deutlich. Diese ist in Abbildung 14 dargestellt.

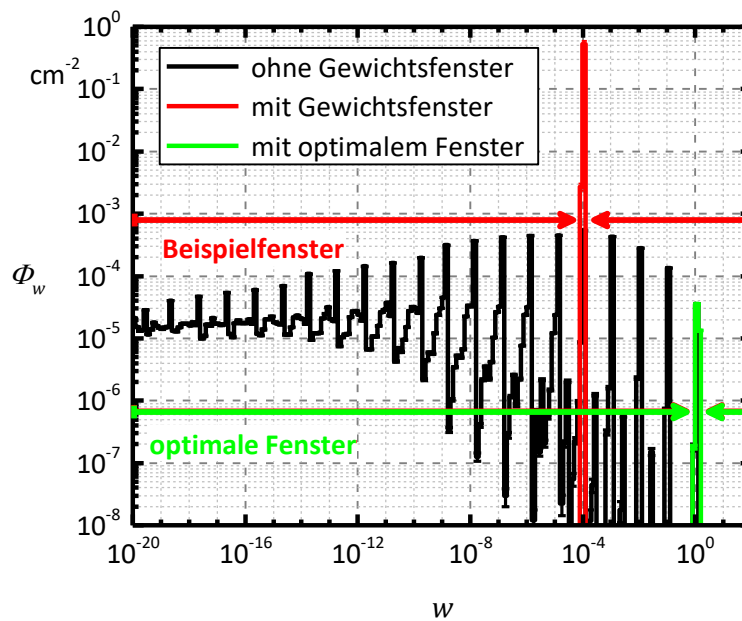


Abbildung 14: Gewichtsbezogene Fluenz Φ_w im Vakuum hinter der Bleiabschirmung aus der Geometrie in Abbildung 12 (Simulation mit impliziter Absorption, Standardunsicherheit mit 68,27% Vertrauensbereich)

Im Ergebnis ohne Gewichtsfenstertechnik fällt eine Vielzahl an Peaks auf. Diese gehören zu Quellphotonen, welche mehrfach in eine Wechselwirkung eintreten. Bei jedem dieser Stoßprozesse wird das Teilchengewicht durch implizite Absorption mit der Nichtabsorptionswahrscheinlichkeit von 11,7% [117] reduziert. Als weitere Wechselwirkung erfolgt dann hauptsächlich kohärente Streuung, wodurch sich die Energie nicht verändert.

Bei 60 keV beträgt die Wahrscheinlichkeit für inkohärente Streuung ein Fünftel der Wahrscheinlichkeit von kohärenter Streuung. Findet sie statt, so wird die Energie verringert. Dies verkleinert auch die Nichtabsorptionswahrscheinlichkeit. Bei der nächsten Wechselwirkung kommt es folglich zu einer stärkeren Gewichtsreduktion. Das Resultat ist eine einseitige Verbreiterung der Peaks.

Die Simulation mit Gewichtsfenstertechnik wird mit dem Strahlungstransportprogramm AMOS zwei Mal durchgeführt, zum einen mit einem intuitiven Gewichtsfenster $w_L = 5 \cdot 10^{-5}$, $w_S = 1 \cdot 10^{-4}$ und $w_U = 5 \cdot 10^{-4}$ entsprechend des Gewichts mit den häufigsten Beiträgen in Abbildung 14 und zum anderen mit einem optimalen Fenster $w_L = 0,675$, $w_S = 1,35$ und $w_U = 2,7$ entsprechend dem inversen des mittleren Teilchenwerts $\zeta_{E\Omega}^*$ der Abschirmung. Das Gewicht der Quellteilchen beträgt immer $w_0 = 1,0$. In beiden Fällen wird die Verteilung stark zusammengeschoben und besteht nur noch aus einem einzigen Peak, Abbildung 14.

Das Fenster bei $w = 1 \cdot 10^{-4}$ konzentriert das Gewicht auf den Bereich der häufigsten Beiträge. Dadurch verkleinert sich die Standardunsicherheit der Fluenz auf etwa die Hälfte. Die Effizienz gemessen durch die FOM sinkt jedoch auf ein Hundertstel. Die Ursache ist die 300-fach erhöhte Rechenzeit für eine große Zahl an zusätzlichen Sekundärteilchen, erzeugt durch 1:10.000-Teilchensplitting beim Eindringen in den Absorber. Dieser Mehraufwand kann nicht durch Russisch-Roulette kompensiert werden

Das optimale Fenster hingegen konzentriert das Gewicht auf einen Bereich zwischen 0,675 und 1,35. Die Standardunsicherheit der Fluenz steigt sogar um etwa 30% an. Es wird jedoch kein rechenzeitvergrößerndes Teilchensplitting durchgeführt und Russisch-Roulette sorgt für eine optimale Vermeidung von Lebensgeschichten mit kleinen Beiträgen. Dies resultiert in eine Verkleinerung der Rechenzeit auf vier Hundertstel und in eine Vergrößerung der Effizienz auf das 15-fache.

Dieses Beispiel zeigt, dass das Setzen der Gewichtsfenster im Allgemeinen nicht intuitiv ist. Daher wird zwingend ein Algorithmus zur Berechnung der Fenstergrenzen benötigt. Dieser steht im Mittelpunkt des folgenden Kapitels.

3 Gewichtsfenstergenerator

Der von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS in [23] beschriebenen Generator zur Berechnung der orts- und energieabhängigen Gewichtsfenstergrenzen basiert auf Monte Carlo Methoden. Er steht im Fokus dieser Arbeit. Nach Gleichung (63) sind diese Grenzen indirekt proportional zum Teilchenwert $\zeta_{E\Omega}^*(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$. Somit ist die Verwendung der adjungierten Monte Carlo Methode naheliegend. Wie bereits dargelegt, sind diese besonders effizient bei Quellen, die ein deutlich größeres Volumen besitzen als der Detektor.

Für Problemstellungen, bei denen die adjungierte Monte Carlo Methode jedoch ineffizient ist, wurde der sogenannte vorwärts-adjungierte Generator für orts- und energieabhängige Gewichtsfenstergrenzen entwickelt [21, 79]. Hierbei wird der Teilchenwert innerhalb einer vorwärts gerichteten Monte Carlo Methode berechnet. Dieser ist definitionsgemäß der erwartete Detektorbeitrag, den ein Teilchen in seiner gesamten Lebensgeschichte machen wird, nachdem es im infinitesimalen Kugelvolumen ΔV am Ort \vec{r} mit der Energie E in Richtung $\vec{\Omega}$ zum Zeitpunkt t in eine Wechselwirkung eintritt.

Für orts- und energieabhängige Gewichtsfenster sind Zeitpunkt und Bewegungsrichtung unbedeutend. Weiterhin sind der Raum und die Energie in diskrete Volumenbereiche ΔV_m mit $m = 1, \dots, M$ und Energiegruppen $\Delta E_g = E_{g+1} - E_g$ mit $g = 1, \dots, G$ unterteilt. Folglich kann innerhalb einer Simulation nur der über eine makroskopische Zelle $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ gemittelte Teilchenwert bestimmt werden.

Um die Teilchen mittels Gewichtsfenstertechnik zum Detektorgebiet zu treiben, ist vor allem der Teilchenwert von Zellen außerhalb des Detektors von Interesse. In diesen Zellen können keine Detektorbeiträge gemacht werden und es ist für die Berechnung des Teilchenwerts unerheblich, ob eine Wechselwirkung innerhalb der Zelle stattfindet. Daher ist es möglich, die Definition des Teilchenwerts aufzuweichen und die Bedingung des Eintretens in eine Wechselwirkung zu vernachlässigen. Folglich wird der Teilchenwert $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ als der erwartete zukünftige Beitrag eines Teilchens, wenn es die Zelle betritt, beschrieben. Zu diesen Beiträgen gehören auch die aller Sekundärteilchen. Es gilt

$$\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g) = \frac{\text{Summe aller zukünftigen Beiträge} \\ \text{der in } \Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g] \text{ eintretenden Teilchen}}{\text{Summe aller Teilchengewichte} \\ \text{der in } \Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g] \text{ eintretenden Teilchen}}. \quad (68)$$

Diese Definition ist auch im Benutzerhandbuch des Transportprogramms MCNP5 [96] enthalten und anhand Abbildung 15 veranschaulicht.

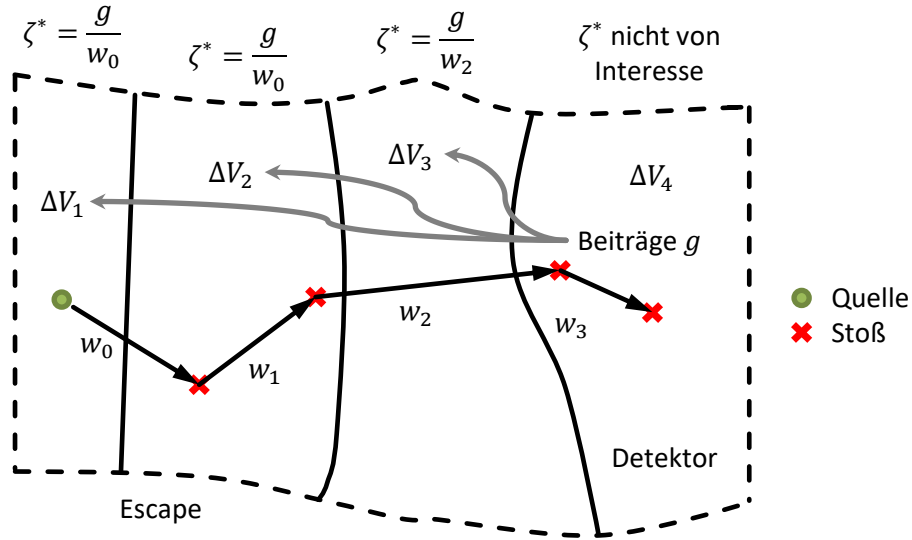


Abbildung 15: Definition des Teilchenwerts einer Zelle (energieunabhängig)

Da sich der Teilchenwert auf alle zukünftigen Detektorbeiträge bezieht, ist dieser von der Art des Monte Carlo Detektors abhängig. Daher muss in der Anwendung darauf geachtet werden, dass der gleiche Detektortyp verwendet wird [72]. Der Zusammenhang zwischen Teilchenwert und Gewichtsfenstergrenzen gilt formal nur für BOLTZMANN'sche Schätzer, da die adjungierte Strahlungstransportgleichung auf der Strahlungstransportgleichung BOLTZMANN'schen Typs basiert. Folglich können auch nur solche Detektortypen verwendet werden.

Für nicht-BOLTZMANN'sche Schätzer wurden diesbezüglich bisher keine umfassenden theoretischen Grundlagen insbesondere im Zusammenhang mit Importance-Sampling entwickelt. Aus diesem Grund stellt auch das Transportprogramm MCNP keinen Gewichtsfenstergenerator für spektrale Energiedepositionsschätzer zu Verfügung und empfiehlt stattdessen ausdrücklich die Verwendung des Fluenzschätzers [56].

Um den vorwärts-adjungierten Gewichtsfenstergenerator im Rahmen dieser Arbeit auf spektrale Energiedepositionsschätzer zu erweitern, wird folglich angenommen, dass die indirekte Proportionalität zwischen Teilchenwert und Gewichtsfenstergrenzen auch für nicht-BOLTZMANN'sche Schätzer gilt. Die Beiträge in der Definition des Teilchenwerts aus (68) beziehen sich demnach auf die Beiträge zum spektralen Energiedepositionsschätzer.

3.1 Güte der Ergebnisse

Der Teilchenwert $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ bezieht sich auf eine Zelle $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$. Damit gelten auch die berechneten Gewichtsfenster für die gesamte Zelle. Die Schwierigkeit besteht in der richtigen Wahl der Zellengröße. Diese muss so erfolgen, dass $\zeta_{E\Omega}^*$ innerhalb der Zelle nur wenig variiert [16]. In diesem Fall gilt die Näherung $\zeta_{E\Omega}^*(q) \approx \zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ für jeden Phasenraumpunkt $q = (\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ innerhalb der Zelle.

Für zu große Zellen ist diese Approximation jedoch nicht mehr gegeben. Die Forderung, dass das Teilchengewicht nach Gleichung (63) indirekt proportional zu $\zeta_{E,\Omega}^*(q)$ sein soll, kann dann nur noch ungenügend erfüllt werden. Die Gewichtsfenstertechnik wird folglich ineffizient. Zusätzlich können zu große Zellen zu einem starken Unterschied in den Gewichtsfenstergrenzen von benachbarten Zellen führen. Die Folge wäre eine sehr große Anzahl an Teilchenfragmenten, die aufgrund eines Speicherüberlaufs möglicherweise nicht mehr vom Transportprogramm verarbeitet werden können.

T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS empfehlen, dass der Unterschied der Teilchenwerte benachbarter Zellen nicht größer als ein Faktor vier sein soll [23]. Das Handbuch des Transportprogramms MCNP empfiehlt hingegen einen Faktor kleiner fünf [56]. Demnach sollten die Zellen möglichst klein gewählt werden. Dann muss aber auch eine größere Anzahl an Lebensgeschichten simuliert werden, da die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen in die Zelle eintritt und im weiteren Verlauf der Lebensgeschichte einen Detektorbeitrag macht, sich mit sinkender Zellgröße verringert.

Die Ursache für einen großen Unterschied im Teilchenwert benachbarter Zellen kann aber auch in einer statistischen Fluktuation liegen, wenn noch keine ausreichende Anzahl an Lebensgeschichten simuliert wurde [23]. Auch hier wird als Hilfestellung von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS der maximale Unterschied vom Faktor vier genannt. Damit ist es für den Anwender nicht eindeutig feststellbar, ob große Unterschiede durch eine schlechte Wahl der Zellgröße oder durch eine zu kleine Anzahl an simulierten Lebensgeschichten verursacht werden.

Die Einteilung in Zellen ist also stark problemabhängig und muss gegebenenfalls variiert werden. Ein Ansatz für die Wahl der räumlichen Komponente ΔV_m einer Zelle ist die bereits vorhandene räumliche Einteilung der Geometrie der Problemstellung. Eine andere Möglichkeit wird von L. LIU und R.P. GARDNER in [32] angegeben und im Transportprogramm MCNP implementiert [56, 118]. Dabei wird die Geometrie zusätzlich in nur für den Gewichtsfenstergenerator sichtbare Voxel ΔV_m mit identischen Energiegruppen $[E_g, E_g + \Delta E_g]$ unterteilt. Der gleiche Ansatz wird auch von A.J. VAN WIJK et al. in [119] verfolgt. Hierbei bleibt jedoch die Frage nach einer richtigen Wahl der Zellgröße unbeantwortet und eine Lösung der vorher diskutierten Probleme wird nicht gegeben.

Es besteht aber die Möglichkeit, durch die Angabe einer Unsicherheit für die berechneten Teilchenwerte dem Anwender ein Maß für deren Güte zur Verfügung zu stellen. In der Literatur wird allerdings keine Möglichkeit zur Angabe einer Unsicherheit diskutiert. Auch das Transportprogramm MCNP gibt keine Unsicherheit für die mit dem Gewichtsfenstergenerator geschätzten Fenster aus [56, 73]. Eine Ursache ist, dass eine umfassende Unsicherheitsangabe auch die systematische Abweichung zur optimalen Wahl der Zellengröße beinhalten müsste. Diese ist jedoch a priori nicht bekannt. Zusätzlich ist eine optimale Beziehung aller Parameter der Gewichtsfenstertechnik zum Teilchenwert nicht allgemein bekannt. Aus diesen Gründen ist es nicht möglich, eine systematische Abweichung zum gewünschten Optimum anzugeben.

Die Angabe einer Standardunsicherheit des geschätzten Wertes ist jedoch möglich und wird im Rahmen dieser Arbeit hergeleitet. Damit wird dem Anwender ein Werkzeug zur Einschätzung der Konvergenz gegeben, was insbesondere bei zu kleiner Zellgröße hilfreich ist.

Werden Zähler und Nenner in der Definition des Teilchenwerts $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ in Gleichung (64) mit der Anzahl N an Lebensgeschichten erweitert, so werden beide Summen formal zu Mittelwerten. Es gilt dann

$$\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g) = \frac{F(\Delta V_m, \Delta E_g)}{W(\Delta V_m, \Delta E_g)} \quad (69)$$

mit dem mittleren zukünftigen Detektorbeitrag $F(\Delta V_m, \Delta E_g)$ aller in $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ eintretenden Teilchen und deren mittleren Teilchengewicht $W(\Delta V_m, \Delta E_g)$. Damit ist es möglich, für beide Größen eine Standardunsicherheit nach GUM Supplement 1 [95] zu ermitteln. Da beide Größen korreliert sind und die Korrelation nur mit vergleichsweise großem Aufwand berechnet werden kann, wird als Abschätzung von maximal korrelierten Größen ausgegangen. Es folgt

$$\Delta \zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g) = \zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g) \cdot \left(\frac{\Delta F(\Delta V_m, \Delta E_g)}{F(\Delta V_m, \Delta E_g)} + \frac{\Delta W(\Delta V_m, \Delta E_g)}{W(\Delta V_m, \Delta E_g)} \right). \quad (70)$$

mit

$$\Delta F(\Delta V_m, \Delta E_g) = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^N F_k^2(\Delta V_m, \Delta E_g) - \frac{1}{N} [\sum_{k=1}^N F_k(\Delta V_m, \Delta E_g)]^2}{N \cdot (N - 1)}} \quad (71)$$

und

$$\Delta W(\Delta V_m, \Delta E_g) = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^N W_k^2(\Delta V_m, \Delta E_g) - \frac{1}{N} [\sum_{k=1}^N W_k(\Delta V_m, \Delta E_g)]^2}{N \cdot (N - 1)}} \quad (72)$$

als Standardunsicherheit des Teilchenwerts einer Zelle.

Anhand eines Beispiels soll im Folgenden gezeigt werden, wie der Teilchenwert $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ einer Zelle $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ mittels Monte Carlo Methoden geschätzt werden kann. Dazu ist in Abbildung 16 für eine Lebensgeschichte dargestellt, welche Größen zur Berechnung benötigt werden. Das Gewicht w_i^p ist das Teilchengewicht nach dem i -ten Stoß bzw. zur i -ten Streuordnung. Da bei einer Streuung Sekundärteilchen erzeugt werden können, wird ein weiterer Index p zur Unterscheidung der sich ergebenden Teillebensgeschichten eingeführt. Mit $p = 0$ wird das Primärteilchen identifiziert. Ein Detektorbeitrag $f^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(q_i^p) \cdot w_i^p$ am Phasenraumpunkt q_i^p wird mit g_i^p abgekürzt.

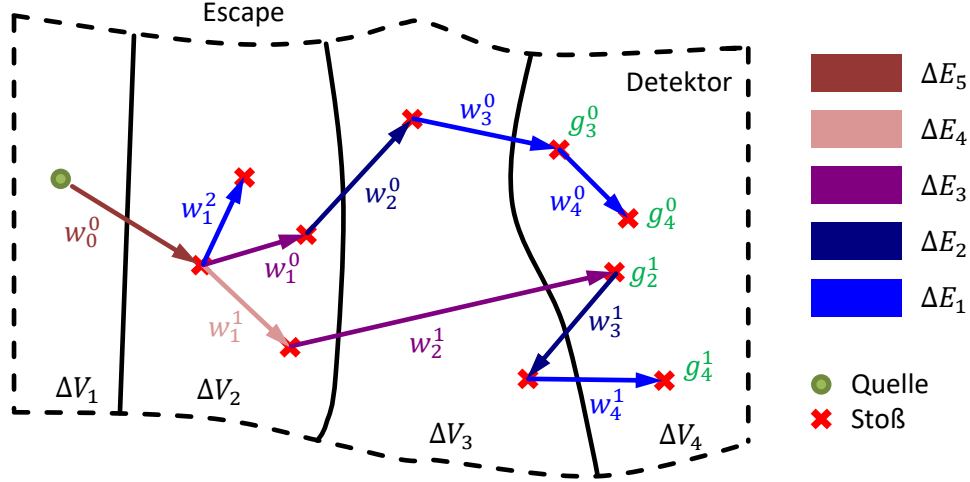


Abbildung 16: Teilchengewichte w_i^p und Detektorbeiträge g_i^p der i -ten Streuordnung und der p -ten Sekundärteilchen-Teillebensgeschichte zur Berechnung des Teilchenwerts für alle Raumbereiche $\Delta V_1 \dots \Delta V_4$ und alle Energieintervalle $\Delta E_1 \dots \Delta E_5$ beispielhaft anhand einer Lebensgeschichte

In diesem Beispiel ist die Geometrie in vier Raumbereiche $\Delta V_1 \dots \Delta V_4$ und fünf Energieintervalle $\Delta E_1 \dots \Delta E_5$ in insgesamt 20 Zellen unterteilt. Die Teilchengewichte und Detektorbeiträge, welche zur Berechnung von $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ für jede Zelle benötigt werden, sind in Tabelle 1 aufgelistet. Beispielsweise ergibt sich für den Teilchenwert des Raumbereichs ΔV_1 für die Energieintervalle $\Delta E_1 \dots \Delta E_4$ ein Wert von 0, denn in die entsprechenden Zellen sind keine Teilchen eingetreten.

Tabelle 1: Teilchengewichte w_i^p und Detektorbeiträge g_i^p der i -ten Streuordnung und der p -ten Sekundärteilchen-Teillebensgeschichte zur Berechnung des Teilchenwerts $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ für alle Raumbereiche $\Delta V_1 \dots \Delta V_4$ und alle Energieintervalle $\Delta E_1 \dots \Delta E_5$ der Beispielgeometrie aus Abbildung 16

$\frac{F_k(\Delta V_m, \Delta E_g)}{W_k(\Delta V_m, \Delta E_g)}$	ΔV_1	ΔV_2	ΔV_3	ΔV_4
ΔE_1	$\frac{0}{0}$	$\frac{0}{w_1^2}$	$\frac{g_3^0 + g_4^0 + g_4^1}{w_3^0 + w_4^1}$	$\frac{g_3^0 + g_4^0 + g_4^1}{w_3^0 + w_4^0 + w_4^1}$
ΔE_2	$\frac{0}{0}$	$\frac{g_3^0 + g_4^0}{w_2^0}$	$\frac{g_3^0 + g_4^0 + g_4^1}{w_2^0 + w_3^1}$	$\frac{g_4^1}{w_3^1}$
ΔE_3	$\frac{0}{0}$	$\frac{g_3^0 + g_4^0 + g_2^1 + g_4^1}{w_1^0 + w_2^1}$	$\frac{g_2^1 + g_4^1}{w_2^1}$	$\frac{g_2^1 + g_4^1}{w_2^1}$
ΔE_4	$\frac{0}{0}$	$\frac{g_2^1 + g_4^1}{w_1^1}$	$\frac{0}{0}$	$\frac{0}{0}$
ΔE_5	$\frac{g_3^0 + g_4^0 + g_2^1 + g_4^1}{w_0^0}$	$\frac{g_3^0 + g_4^0 + g_2^1 + g_4^1}{w_0^0}$	$\frac{0}{0}$	$\frac{0}{0}$

Wird für dieses Beispiel angenommen, dass der Raumbereich ΔV_1 stoffleer ist, so würde jedes aus ΔV_2 zurück gestreute Teilchen die Geometrie durch Teilchenescape verlassen. Folglich kann der Teilchenwert des Raumbereichs ΔV_1 für die Energieintervalle $\Delta E_1 \dots \Delta E_4$ niemals größer null sein. Aufgrund der inversen Proportionalität müsste das Gewichtsfenster in diesen Zellen im unendlichen liegen.

Anhand dieses Beispiels wird eine von zwei Problemsituationen deutlich, in denen sich ein Teilchenwert $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ von null ergibt. Entweder können, wie im Beispiel, alle eintretenden Teilchen prinzipiell keine Beiträge mehr zum Detektor liefern oder, die Wahrscheinlichkeit nach Betreten zum Detektor zu gelangen, ist nur sehr klein. In beiden Fällen kann ein vergleichsweise hohes Überlebensgewicht für diese Zelle gesetzt werden, da die Beiträge zum Ergebnis vernachlässigbar sind. Die gewünschte Folge ist, dass die Simulation in diese Zellen eindringender Teilchen mit hoher Wahrscheinlichkeit durch Russisch Roulette beendet wird. Insbesondere zu Beginn einer Simulation besteht jedoch die Gefahr, dass aufgrund einer zu geringen Anzahl an simulierten Quellteilchen eine eigentlich bedeutende Zelle fälschlicherweise vernachlässigt wird.

Um im Allgemeinen einschätzen zu können, ob der Teilchenwert signifikant null ist, kann die Standardunsicherheit des Teilchenwerts nach Gleichung (70) verwendet werden. Wegen der fehlenden Detektorbeiträge gilt $F(\Delta V_m, \Delta E_g) = 0$. Damit ergeben sich auch $\Delta F(\Delta V_m, \Delta E_g) = 0$ und $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g) = 0$. Folglich kann nur mit Hilfe des mittleren Teilchengewichts $W(\Delta V_m, \Delta E_g)$ eine Aussage getroffen werden. Ist $W(\Delta V_m, \Delta E_g) > 0$ kann die Signifikanz für $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g) = 0$ mittels der Standardunsicherheit $\Delta W(\Delta V_m, \Delta E_g)$ eingeschätzt werden. Ein Teilchenwert von null für die betreffende Zelle wird dann festgesetzt, wenn $\Delta W(\Delta V_m, \Delta E_g)$ kleiner als eine vom Benutzer festgelegte Grenze ist.

Um diese Forderung nach einem nahezu unendlichen Überlebensgewicht zu approximieren, wird im Rahmen dieser Arbeit für die untere Gewichtsfenstergrenze ein vergleichsweise großer Gewichtswert angenommen. Da ein solcher Maximalwert nicht problemunabhängig festgesetzt werden kann, wird für Zellen mit Teilchenwert $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g) = 0$ der kleinste Teilchenwert von allen Zellen der Geometrie und damit das global größte Überlebensgewicht festgelegt.

3.2 Iterative Berechnung

Es besteht prinzipiell die Möglichkeit zur iterativen Berechnung des Teilchenwerts $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ und der dazugehörigen Gewichtsfenster. Dazu werden abwechselnd adjungierte und vorwärts gerichtete Simulationen durchgeführt. Dies ist in Abbildung 17 dargestellt.

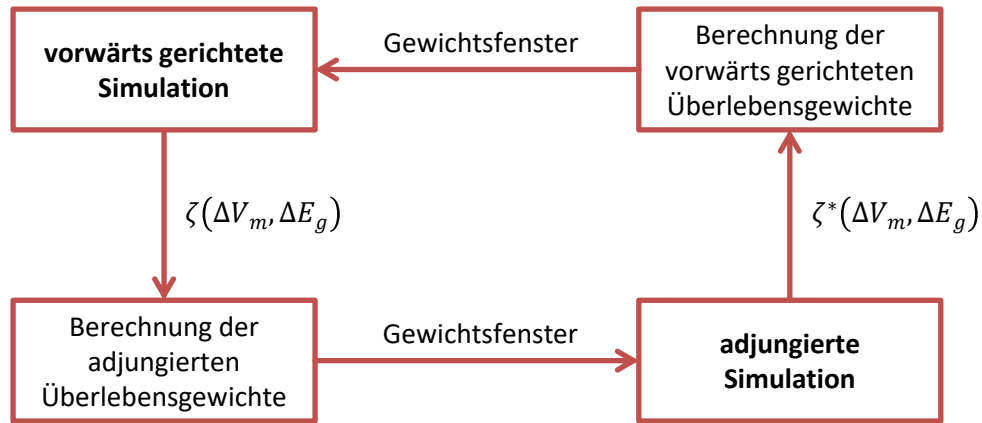


Abbildung 17: Iterative Berechnung der Gewichtsfenster durch abwechselnd adjungierte und vorwärts gerichtete Simulation

Die vorwärts gerichtete Simulation schätzt die Stoßteilchendichte $\zeta(\Delta V_m, \Delta E_g)$ für einen vergleichsweise geringen Umfang an Lebensgeschichten. Mit Hilfe dieser Größe werden anschließend die Gewichtsfenster für die entsprechende adjungierte Simulation berechnet. Auch diese wird nur für einen vergleichsweise geringen Umfang an Lebensgeschichten durchgeführt. Das Ergebnis ist der Teilchenwert $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ (adjungierte Stoßteilchendichte), mit dem wiederum die Gewichtsfenster für die vorwärts gerichtete Simulation berechnet werden. Dieses Vorgehen wird solange wiederholt, bis entweder die Effizienz der Simulation nicht weiter verbessert werden kann oder das gewünschte Ergebnis mit ausreichender Standardunsicherheit bekannt ist.

Bei diesem Ansatz ist jedoch von Nachteil, dass vorwärts gerichtete und adjungierte Simulation abwechselnd neu gestartet werden müssen. Außerdem kann in Problemstellungen mit Punktquellen und großen Detektoren eine adjungierte Simulation sehr ineffizient sein. Gleiches gilt für vorwärts gerichtete Berechnungen für große Volumenquellen und vergleichsweise sehr kleine Detektoren.

Mit dem vorwärts-adjungierten Gewichtsfenstergenerator von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS [23] werden der Teilchenwert $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ und die entsprechenden Gewichtsfenster ausschließlich innerhalb einer vorwärts gerichteten Monte Carlo Methode berechnet. Durch das sukzessive Erneuern der Gewichtsfenstergrenzen nach der Berechnung eines vergleichsweise geringen Umfangs an Stichproben für Lebensgeschichten ergibt sich somit ein iterativer Algorithmus, welcher ohne Wechsel der Simulationsart auskommt. Wie bereits im letzten Kapitel dargelegt ist bei diesem Vorgehen wiederum nachteilig, dass zur Berechnung des Teilchenwerts jede Lebensgeschichte nach Beendigung rückwärts analysiert werden muss.

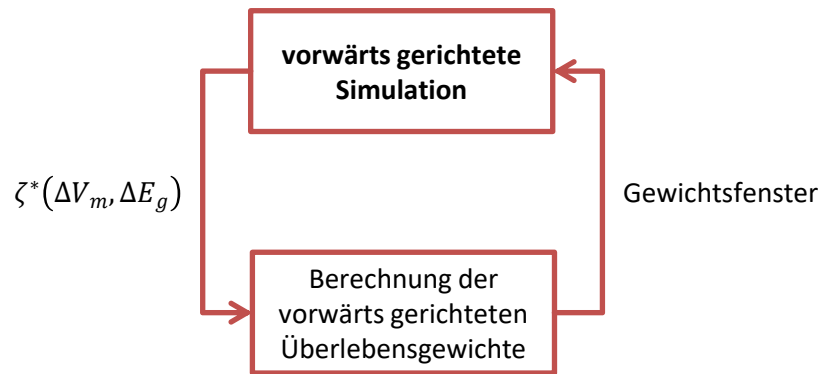


Abbildung 18: Iterative Berechnung der Gewichtsfenster in einer vorwärts gerichtete Simulation

In jeder Iteration wird nur eine vergleichsweise geringe Anzahl an Lebensgeschichten zur Berechnung des Teilchenwerts simuliert. Aus diesem Grund ist es sehr wahrscheinlich, dass sich für einen Teil der Zellen insbesondere zu Beginn der Berechnung ein Teilchenwert ζ^* von null ergibt. Wie bereits festgelegt, soll für Zellen mit der Eigenschaft $\zeta^* = 0$ der global kleinste Teilchenwert aller Zellen der Geometrie gesetzt werden.

Dies darf jedoch erst durchgeführt werden, wenn zwei Bedingungen erfüllt sind: erstens muss dieser kleinste Wert mit ausreichender Genauigkeit bekannt sein und zweitens muss für jede betreffende Zelle $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ der Teilchenwert signifikant null sein. Letzteres wird über die Standardunsicherheit $\Delta W(\Delta V_m, \Delta E_g)$ des mittleren Teilchengewichts eingeschätzt. Insbesondere wenn die Zellen zu klein gewählt sind, ist die Wahrscheinlichkeit, dass Teilchen in die Zelle eintreten, gering. Um dann die Standardunsicherheit $\Delta W(\Delta V_m, \Delta E_g)$ zu berechnen, müssen gegebenenfalls sehr viele Lebensgeschichten simuliert werden. Dadurch kann die Berechnung der Gewichtsfenster sehr viel Rechenzeit in Anspruch nehmen.

In solch einem Fall ist es wünschenswert, eine Möglichkeit zum automatisierten Zusammenlegen von Zellen zu haben. Dabei sollen solche Zellen, bei denen die Standardunsicherheit des Teilchenwerts zu groß ist, mit benachbarten Zellen vereinigt werden. Für die so definierte vereinigte Zelle wird ein gemeinsamer Teilchenwert mit empirischer Standardunsicherheit berechnet. Die Vereinigung muss nun so lange durchgeführt werden, bis die Standardunsicherheit unter eine benutzerseitig festgelegte Schwelle fällt. Dann erhalten alle Zellen der Vereinigung anhand des gemeinsamen Teilchenwerts ein gemeinsames Gewichtsfenster. Wird die Schwelle nicht erreicht, kann kein Gewichtsfenster festgelegt werden und die Simulation wird in diesen Zellen nur mit einer unteren Gewichtsgrenze entsprechend der kleinsten unteren Grenze der Geometrie durchgeführt.

Zu Beginn der Iteration sind die vereinigten Zellen noch sehr groß. Für die Energieabhängigkeit ergeben sich dadurch zunächst energieunabhängige Fenster. Mit jedem Iterationsschritt können die vereinigten Zellen dann weiter aufgeteilt werden. Letztendlich muss jedoch der Benutzer entscheiden, ob er die Berechnung der Gewichtsfenster vorzeitig beendet, oder wartet, bis der Teilchenwert für

jede Zelle signifikant bestimmt ist. Gerade besonders unbedeutenden Zellen kann auch bei einer sehr großen Anzahl simulierter Quellteilchen kein Teilchenwert von null zugeordnet werden und die geforderte Mindeststandardunsicherheit wird praktisch nie erreicht.

T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS betonen in [23], dass für ihren Gewichtsfenstergenerator für die meisten Problemstellungen ungefähre Startwerte gegeben sein müssen. Die Ursache liegt in der Notwendigkeit des Erhaltens von Detektorbeiträgen zur Parameterberechnung. Diese sind jedoch gerade in Geometrien, in denen die Wahrscheinlichkeit eines Detektortreffers gering ist, selten. Hierbei wird demnach die Erfahrung des Anwenders benötigt. Ein vorgeschlagener Ausweg für unerfahrene Anwender ist die sogenannte On-The-Fly-Methode von J.S. HENDRICKS [23, 80]. Für diese Methode muss jedoch ein vorwärts-adjungierter Generator implementiert sein. Dies steht im Fokus dieser Arbeit. Darauf aufbauend können dann Untersuchungen zur On-The-Fly-Methode und ähnlichen Ansätzen in weiterführenden Arbeiten durchgeführt werden.

Die Herleitung zur Ermittlung des Teilchenwerts vereinigter Zellen ist ausführlich im Anhang D dargestellt. Das Problem ist, dass die Gewichte und Beiträge vereinigter Zellen nicht einfach addiert werden können. Teilchen, die durch eine Wechselwirkung innerhalb eines Raumbereichs zwischen den Energieintervallen $\Delta E_i \dots \Delta E_j$ einer vereinigten Zelle wechseln, würden dann zu viel gezählt. Also müssen die zugehörigen Beiträge und Gewichte abgezogen werden. Daraus ergibt sich folgende Berechnungsvorschrift für die Summe der Teilchengewichte $W_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)$ und der zukünftigen Beiträge $F_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)$ benachbarter vereinigter Zellen innerhalb eines Raumbereichs ΔV_m . Es gilt

$$\begin{aligned}
 F_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j) &= \sum_{g=i}^j \sum_{g'=1}^G F_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_i) \\
 &\quad - \sum_{\substack{g, g'=i \\ g \neq g'}}^j F_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g) \\
 &= \sum_{g'=1}^{i-1} \sum_{g=i}^j F_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g) \\
 &\quad + \sum_{g=i}^j F_k(\Delta V_m, \Delta E_g \rightarrow \Delta E_g) \\
 &\quad + \sum_{g'=j+1}^G \sum_{g=i}^j F_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g)
 \end{aligned} \tag{73}$$

für $F_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)$. Die entsprechende Gleichung für $W_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)$ ist formgleich. G ist hierbei die Anzahl an Energieintervallen.

Für den Teilchenwert $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)$ folgt entsprechend Gleichung (69)

$$\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j) = \frac{\sum_{k=1}^N F_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)}{\sum_{k=1}^N W_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)} \quad (74)$$

mittels Summation über alle N Lebensgeschichten.

$W_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g)$ umfasst hierbei alle Gewichte von Teilchen, die im Raumbereich ΔV_m durch eine Wechselwirkung vom Energieintervall $\Delta E_{g'}$ kommend in das Intervall ΔE_g getreten sind. Das Teilchengewicht $W_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)$ vereinigter Zellen ist die Summe aus allen Gewichten von Teilchen, die im Raumbereich ΔV_m durch Wechselwirkung aus einem niedrigeren oder höheren Energieintervall in das vereinigte Intervall $\Delta E_i \dots \Delta E_j$ gewechselt sind. Hinzu kommt das Gewicht aller Teilchen, welche in ΔV_m mit einer Energie im Bereich $\Delta E_i \dots \Delta E_j$ eingetreten sind. Jeder Energieintervallwechsel innerhalb $\Delta E_i \dots \Delta E_j$ wird nicht beachtet. Entsprechendes gilt für die Beiträge $F_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g)$ und $F_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)$. Dieses Vorgehen spiegelt die anhand des Beispiels im letzten Kapitel demonstrierte Verfahrensweise zur Berechnung des Teilchenwerts einer Zelle wieder, wobei es sich um die spezielle Zelle $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_i + \dots + \Delta E_j]$ handelt.

Da für Photonen keine Wechselwirkung existiert, bei der die Energie vergrößert wird, sind alle Summanden $W_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g)$ und $F_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g)$ mit $g' < g$ immer null und müssen nicht berücksichtigt werden. Gleichung (73) vereinfacht sich dann entsprechend. Bei Neutronen hingegen sorgen insbesondere Stöße im thermischen Energiebereich für eine Vergrößerung der Energie langsamer Neutronen [44]. In diesem Fall müssen alle Energiegruppenwechsel berücksichtigt werden.

Bisher wurde nur die Vereinigung von Zellen mit benachbarten Energiegruppen innerhalb desselben Raumbereichs betrachtet. Prinzipiell lässt sich Gleichung (73) durch zusätzliche Summation auf die Vereinigung benachbarter Raumbereiche erweitern. Dazu müssen die Summen der Teilchengewichte und der zukünftigen Beiträge um eine weitere Dimension erweitert werden. Dadurch wird gespeichert, aus welchem Raumbereich ein Teilchen bei Eintreten in den betrachteten Raumbereich stammt.

Bei der Umsetzung dieser Erweiterung ergeben sich jedoch drei grundlegende Probleme. Erstens vervielfacht sich die Anzahl an zu speichernden Daten zusätzlich um die Anzahl aller Raumbereiche der Geometrie. Zweitens muss bekannt sein, welche Raumbereiche benachbart sind. Im Beispiel von Abbildung 16 ist die Geometrie vergleichsweise einfach und die Nummerierung kann stetig entlang einer Dimension erfolgen, da jeder Raumbereich nur zwei Nachbarn entlang einer Raumdimension besitzt. Im Allgemeinen ist die Anzahl der Nachbarbereiche jedoch beliebig, sodass diese Information zusätzlich gespeichert werden müsste.

Drittens vervielfacht sich die Anzahl an Kombinationsmöglichkeiten bezüglich der Auswahl von zu vereinigenden Nachbarbereichen. Besitzt ein Raumbereich sechs Nachbarn (zwei bezüglich jeder Dimension), so existieren sechs Möglichkeiten zur Vereinigung mit einem Nachbarbereich und schon $6 \cdot$

5 = 30 Möglichkeiten zur Vereinigung mit zwei Nachbereichen. Schlechtesten Falls muss der Teilchenwert für jede Kombination berechnet werden und in keinem Fall ist die Standardunsicherheit klein genug. Folglich sind übernächste Nachbarn mit einzubeziehen. Somit würde die Berechnungszeit stark ansteigen. Insbesondere aufgrund dieses Problems wird im Rahmen dieser Arbeit nur die Vereinigung von Zellen bezüglich der Energie, innerhalb eines Raumbereichs betrachtet.

3.3 Implementation in AMOS

Um die Gewichtsfensterstechnik und den zugehörigen Generator für Photonen in das Strahlungstransportprogramm AMOS zu integrieren, müssen umfangreiche Veränderungen der Transport- und Schätzalgorithmen für Detektorbeiträge durchgeführt werden. Eine detaillierte Darstellung der Implementationen ist in Anhang E gegeben.

3.3.1 Transportprozess

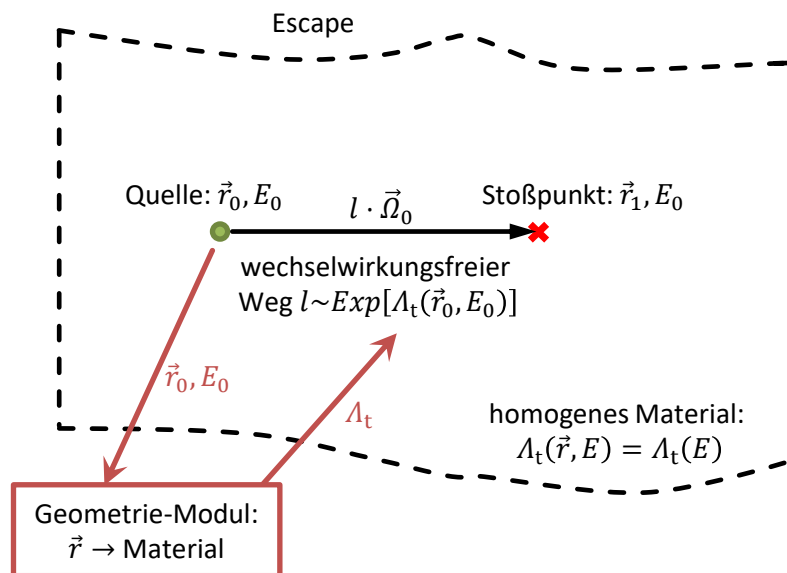


Abbildung 19: Transportprozess zur Bestimmung des nächsten Wechselwirkungsorts (Stoßpunkt) im selben Material

Während des Transportprozesses muss ein neuer Wechselwirkungsort (Stoßpunkt) bestimmt werden, Abbildung 19. Da die wechselwirkungsfreie Weglänge l exponentialverteilt mit der totalen mittleren freien Weglänge $\Lambda_{\text{f}}(\vec{r}, E)$ am Ort \vec{r} zur Energie E als Parameter ist [16],

$$l \sim \text{Exp}[\Lambda_{\dagger}(\vec{r}, E)], \quad (75)$$

wird eine exponentialverteilte Stichprobe erhoben.

Den Wert von $A_t(\vec{r}, E)$ liefert das Geometriemodul. Es kann jedem übergebenen Ort \vec{r} die dortigen Materialeigenschaften zuweisen. Neben der mittleren freien Weglänge gehören auch ortsabhängige Transportparameter dazu. Beispielsweise kann in bestimmten Geometriebereichen der Transport von Sekundärteilchen deaktiviert werden.

Das Ergebnis des Transportprozesses ist der neue Stoßpunkt \vec{r}_1 , berechnet nach

$$\vec{r}_1 = \vec{r}_0 + l \cdot \vec{\Omega}_0 \quad (76)$$

mit der Flugrichtung $\vec{\Omega}_0$ des Teilchens. Hierbei wird davon ausgegangen, dass sich das Material entlang des gesamten Weges nicht ändert. Im Allgemeinen muss dies jedoch vor der Festlegung des Stoßpunkts überprüft werden. Dazu wird die Wegstrecke $\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}_1$ vom Geometrie-Modul auf Überschreitung von Raumbereichsgrenzen untersucht. Jeder Raumbereich der Geometrie ist dabei durch seine Grenzflächen und dem enthaltenen Material eindeutig festgelegt. Kommt es während des Flugs zu einer Grenzüberschreitung, so wird der Durchstoßpunkt \vec{r}'_0 vom Geometrie-Modul berechnet und zurückgegeben. Dies ist in Abbildung 20 dargestellt.

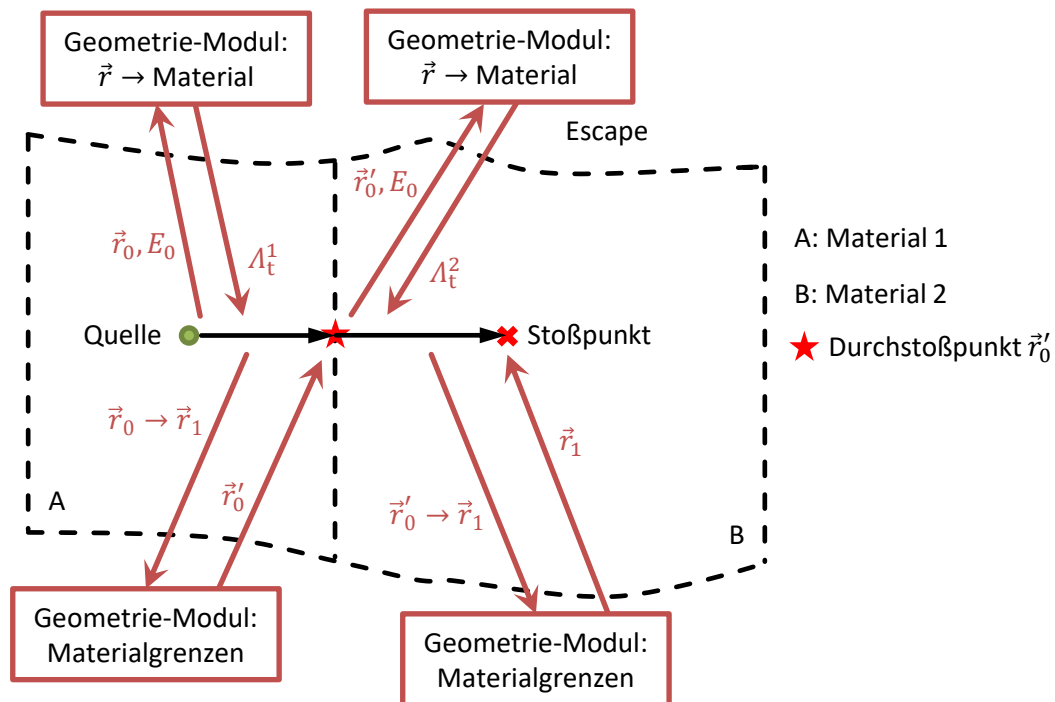


Abbildung 20: Transportprozess zur Bestimmung des nächsten Wechselwirkungsorts (Stoßpunkt) hinter einer Materialgrenze

Vom Punkt \vec{r}'_0 aus wird wieder die mittlere freie Weglänge für das Material an diesem Ort abgefragt und ein neuer wechselwirkungsfreier Weg $\vec{r}'_0 \rightarrow \vec{r}_1$ durch das Erheben einer exponentialverteilten Stichprobe bestimmt. Auch für diese Wegstrecke muss das Überschreiten von Grenzflächen überprüft werden. Im Beispiel in Abbildung 20 wird \vec{r}_1 als Stoßpunkt zurück gegeben. Das Geometrie-Modul gibt auch eine entsprechende Information zurück, wenn die Grenze zum Escape-Bereich überschritten wird.

Der Aufruf des Geometrie-Moduls muss bei jedem Wegschritt zwei Mal durchgeführt werden, zur Abfrage der Materialparameter und zur Durchstoßpunktberechnung. Gerade in dichten Medien mit hoher Ordnungszahl ist die mittlere freie Weglänge sehr klein, wodurch die numerisch aufwändige Durchstoßpunktberechnung häufig durchgeführt wird, Abbildung 21.

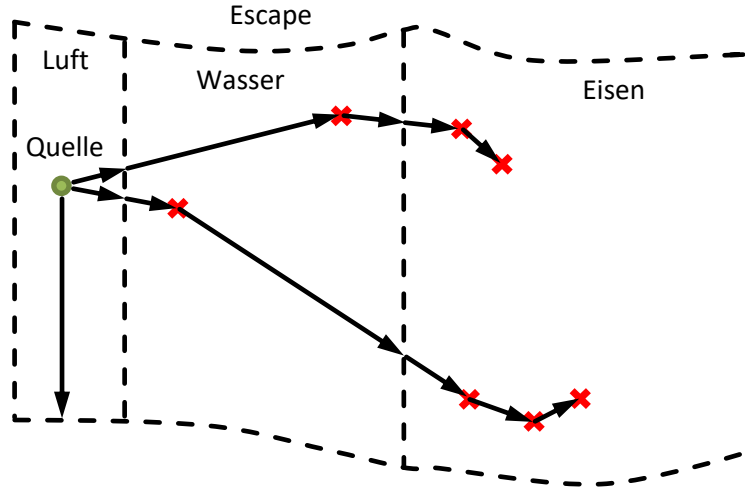


Abbildung 21: Transportprozesse bei mehreren Materialgrenzen

Das Strahlungstransportprogramm AMOS verwendet einen Algorithmus nach W.A. COLEMAN [120], bei dem die Berechnung von Durchstoßpunkten nicht notwendig ist. Dies wird durch die Einführung der minimalen mittleren freien Weglänge $\Lambda_t^{\min}(E)$ realisiert, welche das Minimum der mittleren freien Weglängen aller Materialien der Geometrie zur Energie E darstellt. Unabhängig vom Material wird der wechselwirkungsfreie Weg l immer mit Λ_t^{\min} als Parameter der Exponentialverteilung bestimmt,

$$\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}_1: l \sim \text{Exp}[\Lambda_t^{\min}(E)]. \quad (77)$$

Um diesen Fehler zu korrigieren, muss am ermittelten Ort \vec{r}_1 mit Hilfe einer weiteren gleichverteilten Stichprobe bestimmt werden, ob eine Wechselwirkung tatsächlich stattfindet. Das Kriterium ist hierbei die Wechselwirkungswahrscheinlichkeit $P_W(\vec{r}_1, E)$, welche über

$$P_W(\vec{r}_1, E) = \frac{\Lambda_t^{\min}(E)}{\Lambda_t(\vec{r}_1, E)} \quad (78)$$

definiert ist. Muss kein Stoßprozess durchgeführt werden, so wird dies von AMOS als Nullstoß gezählt und es schließt sich wieder ein Transportschritt an. Andernfalls findet ein sogenannter Realstoß statt. Den so modifizierten Transportprozess für das Beispiel aus Abbildung 21 zeigt Abbildung 22.

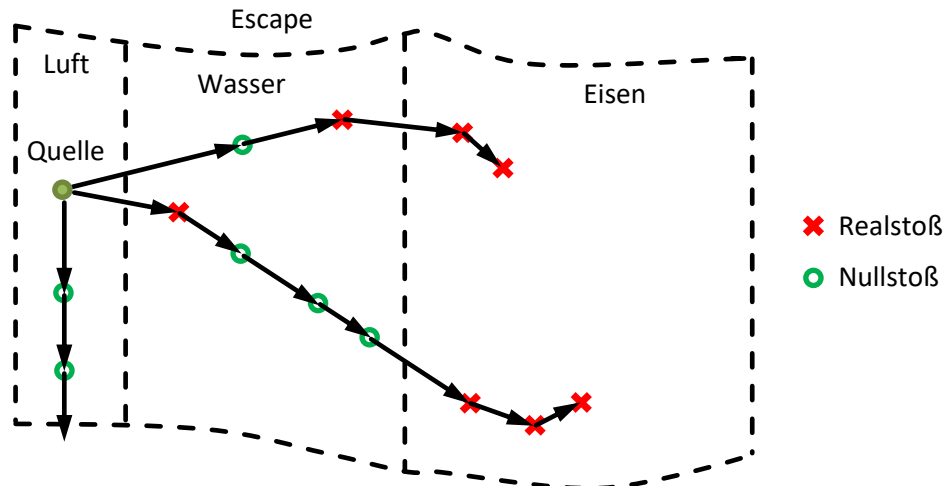
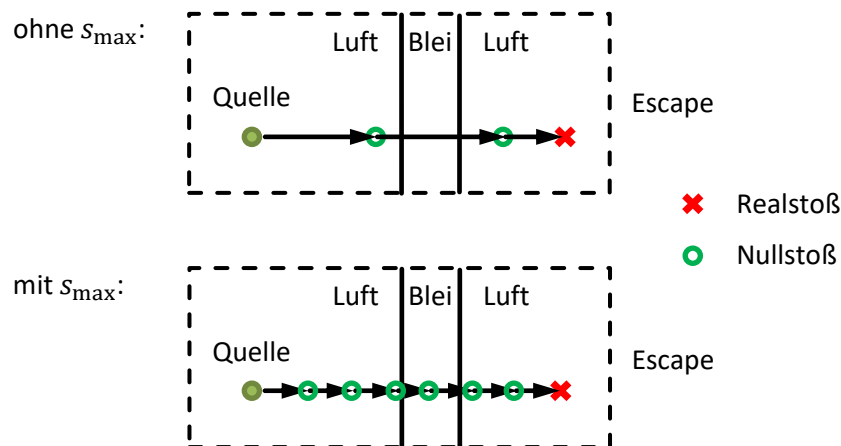


Abbildung 22: Transportprozesse mit Null- und Realstößen bei mehreren Materialgrenzen

Der Nachteil dieses Vorgehens insbesondere in Hinblick auf die ortsabhängige Gewichtsfenstertechnik ist, dass Raumbereiche unbemerkt durchflogen werden können. Dadurch können lokal geforderte Gewichte nicht für alle eintretenden Teilchen gesetzt werden und die Methode wird ineffizient. Ein Ausweg bietet die Einführung einer oberen Schranke s_{\max} für den wechselwirkungsfreien Weg. Diese ist in Abbildung 23 veranschaulicht.

Abbildung 23: Wirkung einer oberen Schranke s_{\max} für den wechselwirkungsfreien Weg

Der mit Hilfe der minimalen mittleren freien Weglänge bestimmte Weg l wird bei Überschreiten der oberen Schranke s_{\max} auf deren Wert gesetzt. Der so bestimmte Ort wird als Nullstoßpunkt gezählt und es folgt eine weitere exponentialverteilte Stichprobe für den freien Weg. Auch diese wird gegebenenfalls auf den Wert von s_{\max} reduziert und damit ein weiterer Nullstoßpunkt erzeugt. Diese Prozedur wird solange wiederholt, bis die Stichprobe des freien Wegs kleiner oder gleich s_{\max} ist.

Anschließend wird mit Hilfe der Wechselwirkungswahrscheinlichkeit P_W entschieden, ob ein Realstoß durchzuführen ist. Der auf diese Weise ermittelte wechselwirkungsfreie Weg ist wieder exponentialverteilt mit der gleichen mittleren freien Weglänge, was in [67] bewiesen wird. Der dazugehörige detaillierte Programmablaufplan befindet sich im Anhang E.

3.3.2 Gewichtsfenstertechnik

Der implementierte Algorithmus zur Umsetzung der Gewichtsfenstertechnik folgt den Vorgaben von I. LUX und L. KOBLINGER [16] und wurde bereits im Strahlungstransportprogramm AMOS implementiert [63]. Das zugehörige Flussdiagramm ist in Anhang E dargestellt. Entsprechend der Energiegruppe g und des Raumbereichs ΔV_m , in dem sich das Photon gerade befindet, werden die untere und die obere Gewichtsfenstergrenze w_L und w_U und das Überlebensgewicht w_S der Zelle $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ nachgeschlagen. Mit Hilfe des Teilchengewichts w wird anschließend entschieden, ob Russisch Roulette ($w > w_U$) Teilchensplitting ($w < w_L$) oder keines von beiden durchgeführt wird.

Die Gewichtsfenstertechnik muss immer dann ausgeführt werden, wenn sich das Teilchengewicht geändert hat oder das Teilchen in eine neue Zelle eintritt. Diese Anforderungen wurden in AMOS bisher nur teilweise umgesetzt. Die Kontrolle der Gewichte erfolgte nur für das Primärteilchen nach Gewichts Anpassung beim Photoeffekt. Das Betreten einer neuen Zelle wurde nicht überwacht. Außerdem konnte die Gewichtsfenstertechnik nur bei einem Fluenzschätzer verwendet werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Technik vollständig implementiert. Dies umfasst die Gewichtskontrolle bei Änderung von Gewicht oder Energie und beim Betreten einer neuen Zelle. Zusätzlich soll deren Verwendung auch bei der Simulation von Energiedepositionsschätzern ermöglicht werden.

Die erste Kontrolle erfolgt direkt nach der Quellemission, was auch die Sekundärteilchenemission einschließt. Dadurch sollen Teilchen mit einem Gewicht außerhalb der lokalen Fenstergrenzen frühzeitig identifiziert werden, welche durch Sekundärprozesse wie zum Beispiel Elektronenwechselwirkungen entstanden sind. Weitere Kontrollen folgen nach jedem Transportschritt, nach der impliziten Absorption und nach der Streuung, Abbildung 24.

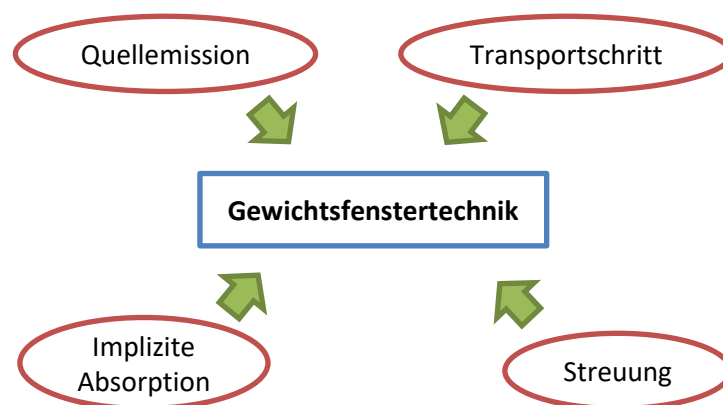


Abbildung 24: Einsatzpunkte der Gewichtsfenstertechnik

Zu einem Transportschritt gehört insbesondere die maximale freie Weglänge, welche über die obere Schranke s_{\max} benutzerseitig festgelegt ist. Wird ein neuer Stoßpunkt, Nullstoß oder Realstoß, festgelegt, so erfolgt gegebenenfalls die Berechnung des Beitrags zum Fluenzschätzer. Als BOTZMANN'scher Schätzer ist dieser auch unter Verwendung von Importance Sampling erwartungstreu. Als Realisierung des Importance Sampling trifft dies insbesondere auf die Gewichtsfenstertechnik zu. Der Schätzalgorithmus für die spektrale Fluenz muss folglich nicht verändert werden.

Nach dem Transport folgt im Falle eines Realstoßes die implizite Absorption, wobei das Teilchengewicht mit Hilfe der Nichtabsorptionswahrscheinlichkeit angepasst wird. In AMOS gehört nur der Photoeffekt dazu. Das neue Gewicht ergibt sich demnach über

$$w_{i+1} = w_i \cdot \left(1 - \frac{\Sigma_e(\vec{r}_{i+1}, E_i)}{\Sigma_t(\vec{r}_{i+1}, E_i)} \right) \quad (79)$$

mit der Wirkungsquerschnittsdichte Σ_e für Photoeffekt. Alle Sekundärteilchen des Photoeffekts erhalten als Quellgewicht

$$w_0 = w_i \cdot \frac{\Sigma_e(\vec{r}_{i+1}, E_i)}{\Sigma_t(\vec{r}_{i+1}, E_i)}. \quad (80)$$

Beide Gewichte, w_{i+1} und w_0 , müssen durch die Gewichtsfenstertechnik kontrolliert werden. Die Sekundärteilchenberechnung des Photoeffekts wird nur dann durchgeführt, wenn w_0 Russisch Roulette überlebt. Erfolgreiches Russisch Roulette des Primärteilchens führt zur Beendigung der Lebensgeschichte, wobei das Teilchen formal als absorbiert ohne Energiedeposition betrachtet wird. Andernfalls wird der Stoßprozess simuliert, bei Teilchensplitting für jedes Fragment. Nach einer Absorption, Paarbildung, ist die Lebensgeschichte des Fragments beendet. Jedes nicht-absorbierte Fragment hingegen erhält eine neue Energie und muss an dieser Stelle nochmals kontrolliert werden.

Ist der Stoßprozess abgeschlossen, werden alle Energiedepositionen im Detektorgebiet als Beiträge zum spektralen Energiedepositionsschätzer gespeichert. Die Berechnung des Energiedepositionsspektrums nach Beendigung der Lebensgeschichte muss jedoch an die Verwendung der Gewichtsfenstertechnik angepasst werden. Während erfolgreiches Russisch Roulette formal als Absorption ohne Energiedeposition behandelt wird, führt die unphysikalische Erzeugung von Sekundärteilchen bei Teilchensplitting zu einer Überschätzung der Energiedeposition.

Um dieses Problem zu lösen, existieren mehrere Algorithmen [27]. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Dekonvolutionsmethode nach T.E. BOOTH implementiert, welche ausführlich in [27] und [115] dargestellt ist. Der Vorteil dieser Methode gegenüber den Ansätzen Supertrackmethode und Methode des korrigierten Einzelteilchens ist, dass der Transportalgorithmus nicht verändert werden muss und kein zusätzlicher benutzerdefinierter Parameter die Effizienz beeinflussen kann.

Alle Fragmente werden zunächst als Sekundärteilchen gespeichert. Bei der Berechnung des Beitrags zum Energiedepositionsschätzer werden sie jedoch als eine mögliche Fortsetzung der Lebensgeschichte des Primärteilchens betrachtet. Dies ist in Abbildung 25 veranschaulicht. Auch alle erzeugten Sekundärteilchen werden den jeweiligen Strängen zugeordnet. Dadurch entsteht formal eine Vielzahl möglicher Realisierungen der Primärlebensgeschichte.

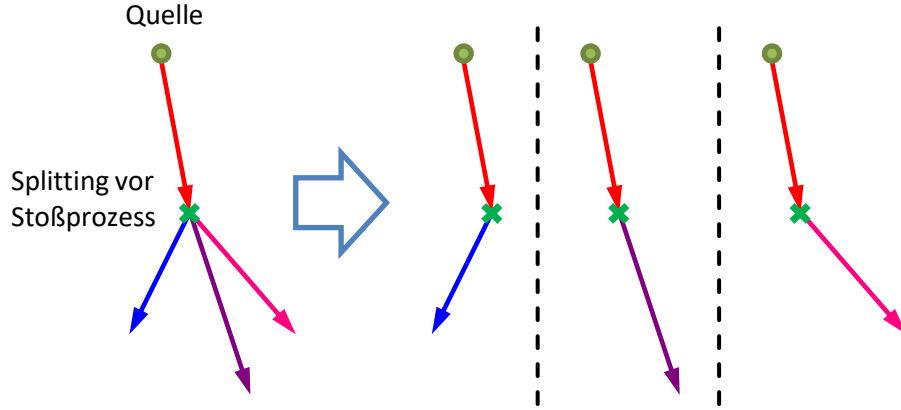


Abbildung 25: Veranschaulichung der Dekonvolutionsmethode (entsprechend Abbildung 11)

Für jede Realisierung der Lebensgeschichte werden schließlich alle Beiträge zum spektralen Energiedepositionsschätzer rekonstruiert. Das auf diese Weise geschätzte Ergebnis ist erwartungstreu [27].

3.3.3 Gewichtsfenstergenerator

Zur Realisierung des vorwärts-adjungierten Gewichtsfenstergenerators wird ein neuer Monte Carlo Detektor implementiert. Das Ziel ist die Schätzung des Teilchenwerts $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ einer Zellen $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ bezüglich des Raumbereichs ΔV_m und des Energieintervalls ΔE_g nach Gleichung (68),

$$\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g) = \frac{\text{Summe aller zukünftigen Beiträge} \\ \text{der in } \Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g] \text{ eintretenden Teilchen}}{\text{Summe aller Teilchengewichte} \\ \text{der in } \Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g] \text{ eintretenden Teilchen}}. \quad (81)$$

Dazu werden die einzelnen Beiträge zum Energiedepositionsschätzer oder zum Photonenfluenzschätzer einer jeden Lebensgeschichte analysiert und den jeweiligen Zellen $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ zugeordnet. Außerdem wird beginnend bei der Quellemission aufgezeichnet, in welchen Zellen das Teilchen mit welchem Gewicht auftritt. Dies erfolgt nach jedem Transportschritt, wozu insbesondere die maximale freie Weglänge gehört, welche über die obere Schranke s_{\max} benutzerseitig festgelegt ist. Mit der Schranke s_{\max} soll sichergestellt werden, dass das Teilchen nur mit geringer Wahrscheinlichkeit unbemerkt durch eine Zelle tritt.

Nach Beendigung der gesamten Lebensgeschichte mit allen zugehörigen Sekundärteilchen und Fragmenten werden den aufgezeichneten Gewichten Detektorbeiträge zugeordnet. Im Falle des Energie-depositionsschätzers geschieht dies zusammen mit der Berechnung der Energiedepositionen im Rahmen der Dekonvolutionsmethode. Eine ausführliche Beschreibung der Implementation ist in Anhang E aufgeführt.

Damit liegen die Summen der Teilchengewichte und die Summen der Beiträge für jede Zelle bereit. Da energieunabhängige Gewichtsfenster schon eine große Effizienzsteigerung bewirken können, ist das Vorgehen in dieser Arbeit, diese möglichst schnell zu berechnen. Erst wenn ein unabhängiges Fenster lokal gesetzt ist, soll es durch energieabhängige Gewichtsfenster ersetzt werden. Aus diesem Grund werden zunächst alle Energieintervalle eines Raumbereichs vereinigt, um für diesen den von der Energie unabhängigen Teilchenwert mit zugehöriger Standardunsicherheit zu berechnen. Ist eine vom Benutzer gesetzte obere Schranke für die Standardunsicherheit der Gewichtsfenster erreicht, werden die energieabhängigen Zellen betrachtet. Ist die Standardunsicherheit zu groß oder ergibt sich ein Teilchenwert von null, werden die Zellen beginnend beim höchsten Energieintervall sukzessive vereinigt. Ist die geforderte obere Schranke für die Standardunsicherheit vereinigter Zellen erreicht, wird der Teilchenwert festgesetzt. Dabei ist es möglich, dass sich letztendlich der energieunabhängige Teilchenwert ergibt.

Alle Teilchenwerte $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$, deren Standardunsicherheiten die geforderte obere Schranke für die Standardunsicherheit erreicht haben, werden über

$$w_S(\Delta V_m, \Delta E_g) = \frac{\zeta_{\max}^*(\Delta V_Q)}{\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)}, \quad (82)$$

$$w_U(\Delta V_m, \Delta E_g) = 2 \cdot w_S(\Delta V_m, \Delta E_g), \quad (83)$$

$$w_L(\Delta V_m, \Delta E_g) = 0,5 \cdot w_S(\Delta V_m, \Delta E_g)$$

in Gewichtsfenstergrenzen umgerechnet. $\zeta_{\max}^*(\Delta V_Q)$ ist hierbei der Teilchenwert der Zelle, welche die Quelle enthält. Dadurch wird sichergestellt, dass das Startgewicht $w_0 = 1$ der Quellteilchen innerhalb eines Gewichtsfensters liegt. Falls Quellemissionen in mehreren unterschiedlichen Energieintervallen existieren, wird der energieunabhängige, mittlere Teilchenwert verwendet.

Von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS wird in [23] empfohlen, dass das Verhältnis zwischen unterer und oberer Grenze in etwa ein Fünftel beträgt. Da ein Computersystem auf dem binären Zahlensystem basiert, können Division und Multiplikation mit 2 besonders effizient durchgeführt werden. Aus diesem Grund gilt in dieser Arbeit der Zusammenhang (83) und das empfohlene Verhältnis wird annähernd erreicht.

Die obere Schranke für die Standardunsicherheit der Gewichtsfenster kann unabhängig von der benutzerdefinierten Zielunsicherheit des Detektorergebnisses definiert werden. Dies ist insbesondere beim iterativen Erneuern der Gewichtsfenster während der Berechnung des eigentlichen Ergebnisses sinnvoll. Während dieses im Allgemeinen mit einer geringen Unsicherheit von wenigen Prozent (99,73% Vertrauensbereich) berechnet werden soll, hat eine Abweichung im Bereich von einigen zehn Prozent für die Überlebensgewichte keinen großen Einfluss auf die Effizienz (Anhang F).

Zur Überprüfung der Ergebnisse werden neben den wieder einlesbaren Gewichtsfensterdaten auch die zugehörigen Teilchenwerte zusammen mit der Standardunsicherheit ausgegeben. Dabei wird für jeden Raumbereich aufgeschlüsselt, welche Zellen vereinigt wurden und wie groß der entsprechende Teilchenwert ist. Dazu gehört insbesondere der energieunabhängige Wert.

Gelangt ein Teilchen von einer Zelle mit sehr hohem Überlebensgewicht in einen Bereich mit um mehrere Größenordnungen niedrigerem Wert, so würde sich entsprechend die Anzahl an Teilchen um mehrere Größenordnungen vergrößern. Dies könnte einen Speicherüberlauf verursachen, wodurch das Programm ohne Speicherung der Ergebnisse beendet werden würde. Um dies zu verhindern, wird die Berechnung der Lebensgeschichte des Teilchens abgebrochen und eine Warnung mit detaillierten Angaben zu den betreffenden Raumbereichen und Energien ausgegeben. Der Benutzer hat somit die Möglichkeit gezielt die Zellenteilung zu verfeinern.

4 Anwendungsbeispiele

4.1 Tiefe Durchdringung von Photonenstrahlung

Die Gewichtsfenstertechnik wurde ursprünglich zur effizienten Lösung des Problems der tiefen Durchdringung entwickelt [21]. Es handelt sich dabei um die Berechnung der Abschirmung von hoch-energetischer Neutronenstrahlung bis zu 14 MeV mittels 300 cm tiefe Betonwand. Diese Tiefe entspricht etwa dem 30-fachen der mittleren freien Weglänge von 14 MeV-Neutronen in Beton. Solche Neutronen werden mit D-T-Neutronen-Fusionsgeneratoren erzeugt, höhere Energien sind auch durch andere Verfahren nicht erreichbar [7]. Mit analoger Monte Carlo Methode ist es jedoch praktisch nicht möglich, die Anzahl an hindurchtretenden Neutronen zu ermitteln [121]. Nur durch den Einsatz effizienzsteigernder Methoden gelang es, ein Ergebnis zu berechnen. Aus diesem Grund wird die Güte von Berechnungsmethoden für Gewichtsfenster häufig anhand des Problems der tiefen Durchdringung bewertet, wie zum Beispiel in [19, 21, 22, 25, 74, 75, 77, 78, 104, 114, 121] dargelegt.

Folglich wird diese Problemstellung für die Evaluation des hier entwickelten Gewichtsfenstergenerators verwendet und auf die Abschirmung einer ^{137}Cs -Quelle mit Blei übertragen. Die Simulationsaufgabe wird auf den Verlauf der Fluenz in Abhängigkeit der Absorberdicke in Schritten einer mittleren freien Weglänge der Quellstrahlung erweitert. Dazu wird zunächst versucht, das Problem mit Hilfe analoger Simulation zu lösen. Anschließend wird der Einfluss von impliziter Absorption betrachtet. Letztendlich soll der Einsatz der Gewichtsfenstertechnik zur Lösung des Problems führen. Die Grenzen werden hierbei mit Hilfe des Gewichtsfenstergenerators berechnet.

4.1.1 Problemstellung

Die Geometrie der Aufgabenstellung ist in Abbildung 26 dargestellt. Zwischen Quelle und Detektor befindet sich ein homogener Absorber. Dessen Tiefe d beträgt ein Vielfaches der mittleren freien Weglänge der von der Quelle emittierten monoenergetischen Strahlung. Quelle und Detektor befinden sich im Vakuum.

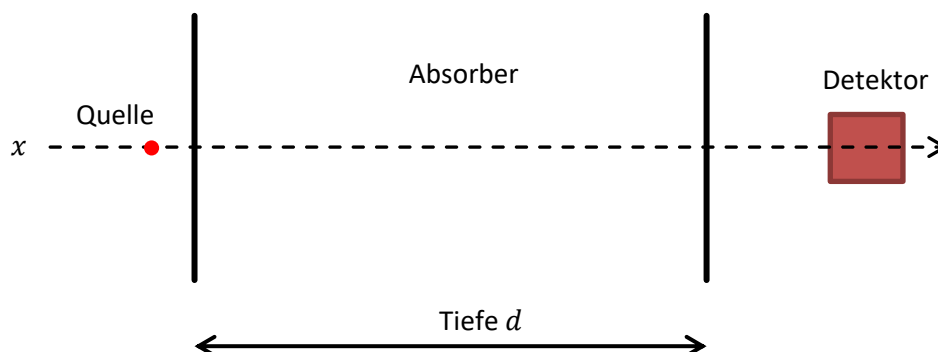


Abbildung 26: Schnitt durch die Geometrie des Problems der tiefen Durchdringung

Eine Abschätzung der Transmission kann über das exponentielle Schwächungsgesetz durchgeführt werden. Dieses beschreibt die Schwächung der spektralen Fluenz $\Phi_E(x, E_Q)$ eines schmalen, parallelen und monoenergetischen Strahlenbündels entlang einer Achse in Materie [8]. Es gilt

$$\Phi_E(x, E_Q) = \Phi_E(0, E_Q) \cdot e^{-\Sigma_t(E_Q) \cdot x} \quad (84)$$

mit der auf den Absorber treffenden spektralen Fluenz $\Phi_E(0, E_Q)$. Betrachtet werden hierbei nur Photonen der Emissionsenergie E_Q . Zur Herleitung aus der Strahlungstransportgleichung müssen folgende Bedingungen angenommen werden. Wenn ein Photon einer Wechselwirkung im Absorber unterliegt, dann führt dies bei inkohärenter Streuung zu einer Energieänderung und es wird nicht mehr zu $\Phi_E(x, E_Q)$ gezählt. Im Falle einer kohärenten Streuung gelangt es aufgrund der Ablenkung nicht mehr zum vergleichsweise kleinen Detektor, Kleinwinkelstreuung wird hierbei vernachlässigt. Durch Photoeffekt und Paarbildung wird das Teilchen absorbiert. Folglich führt jede Wechselwirkung zu einer Schwächung der spektralen Fluenz $\Phi_E(x, E_Q)$. Die mittlere Anzahl an Wechselwirkungen entlang einer Wegstrecke x kann mit Hilfe der totalen Wirkungsquerschnittsdichte $\Sigma_t(E_Q) = 1/\Lambda_t(E_Q)$ nach $\Sigma_t(E_Q) \cdot x$ berechnet werden. Es folgt die Differentialgleichung

$$\frac{d}{dx} \Phi_E(x, E_Q) = -\Sigma_t(E_Q) \cdot x \cdot \Phi_E(x, E_Q) \quad (85)$$

mit der Lösung (84).

Für eine Tiefe des Absorbers von $d = 30 \cdot \Lambda_t(E_Q)$ folgt $\Phi_E(x, E_Q) = \Phi_E(0, E_Q) \cdot 9,36 \cdot 10^{-14}$. Das bedeutet, dass nur jedes elfbillionste Photon des Strahlenbündels den Detektor ohne Wechselwirkung erreicht. Um dieses Ergebnis mit analoger Monte Carlo Methode mit einer Messabweichung von 1% zu bestätigen, müssten erwartungsgemäß etwa $11 \cdot 10^{17}$ Quellteilchen simuliert werden. Dies ist praktisch nicht durchführbar. Effizienzsteigernde Methoden sind daher zwingend notwendig.

Das in (84) formulierte Schwächungsgesetz der Photonenfluenz gilt bei rein eindimensionaler Betrachtung entlang der x -Achse auch unabhängig von der Photonenenergie,

$$\Phi(x) = \Phi(0) \cdot e^{-\Sigma_t(E_Q) \cdot x}, \quad (86)$$

was durch Integration über alle Energien aus (84) gewonnen wird. Kohärente und inkohärente Streuung sorgen für ein Verlassen der Achse. Durch Photoeffekt und Paarbildung kommt es zur Absorption. Folglich treten keine Photonen mit Energien $E < E_Q$ auf und die Energieabhängigkeit der Wirkungsquerschnittsdichte Σ_t muss nicht berücksichtigt werden.

Bei Betrachtung eines realen Absorbers gelangen jedoch auch inkohärent gestreute Photonen in den Detektor. Dadurch vergrößert sich die spektrale Fluenz $\Phi_E(x, E)$ im Energiebereich $E < E_Q$. Diese Beiträge sind von besonderem Interesse bei der Berechnung der deponierten Energie und können ebenfalls nur durch Monte Carlo Methode bestimmt werden.

4.1.2 Analoge Monte Carlo Methode

Betrachtet wird die Transmission von Photonenstrahlung der Energie $E = 661,7 \text{ keV}$ in Blei. Dabei handelt es sich um die mit 85,1% wahrscheinlichste Photonenemission des Isotops Cäsium-137 (^{137}Cs) [122]. Die totale Wirkungsquerschnittsdichte beträgt $\Sigma_t(E) = 1,242 \text{ cm}^{-1}$, die mittlere freie Weglänge $\Lambda_t(E) = 0,805 \text{ cm}$ [123] (Abbildung 27). Findet eine Wechselwirkung in Blei statt, so handelt es sich mit einer Wahrscheinlichkeit von 54,6% um inkohärente Streuung, mit 39,3% um Photoeffekt und mit 6,1% um kohärente Streuung.

Weiterhin existieren noch Röntgenemissionen im Bereich bis etwa 38 keV mit einer Gesamtemissionswahrscheinlichkeit von ca. 7,8%. Die Photoeffektwahrscheinlichkeit steigt für diese Photonen auf 93,0% und die mittlere freie Weglänge sinkt auf $\Lambda_t(38 \text{ keV}) = 0,056 \text{ mm}$. Pro Wegstrecke finden im Mittel etwa 131 Wechselwirkungen mehr statt. Dieser Energiebereich kann also bei der Berechnung der tiefen Durchdringung vernachlässigt werden.

Die so definierte monoenergetische Quelle wird als monodirektionale Nadelstrahlquelle präpariert und in einem Abstand von 1 cm zur Absorberoberfläche positioniert. Die Tiefe d des Absorbers wird beginnend bei $d = 0 \text{ cm}$ schrittweise um den Wert der mittleren freien Weglänge $\Lambda_t(661,7 \text{ keV})$ vergrößert, bis $d = 30 \cdot \Lambda_t(661,7 \text{ keV}) = 24,15 \text{ cm}$ erreicht ist. Als Detektor dient ein zylinderförmiger NaI(Tl)-Kristall mit Höhe und Durchmesser von $5,08 \text{ cm} = 2''$. Dieser befindet sich in einem konstanten Abstand von 29 cm zur Quelle. Ein ebener x-Schnitt bei $x = 7,0 \text{ cm}$ durch die Geometrie ist in Abbildung 28 dargestellt. Insgesamt umfasst die Geometrie einen Bereich von $14 \times 14 \times 35,08 \text{ cm}^3$.

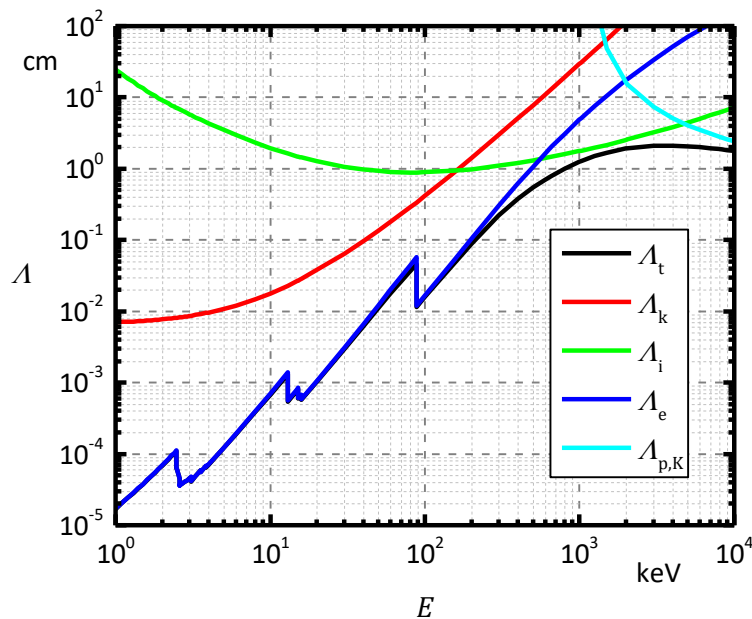


Abbildung 27: Mittlere freie Weglänge Λ von Photonen in Blei [123] (t – total, k – kohärente Streuung, i – inkohärente Streuung, e – Photoeffekt, p,K – Paarbildung im Kernfeld)

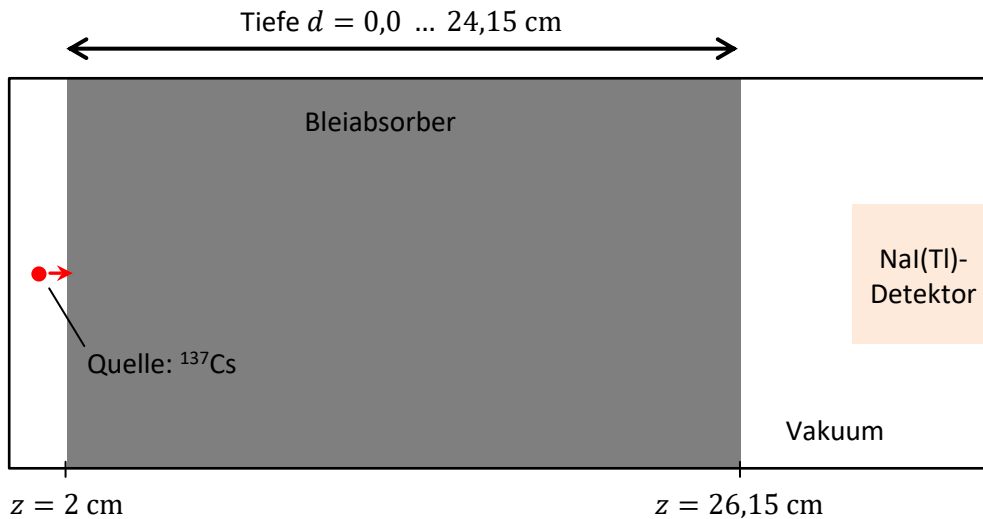


Abbildung 28: Schnitt bei $x = 7,0$ cm durch die Geometrie des Problems der tiefen Durchdringung für Photonenstrahlung des Isotops ^{137}Cs in Blei

Für die auf diese Weise definierte Geometrie werden 10^7 Quellphotonen zehn Mal wiederholend mittels analoger Monte Carlo Methode simuliert. Das zu berechnende Ergebnis ist die spektrale Photonenfluenz Φ_E pro Quellemission. Dabei kann auf eine detaillierte Simulation der entstehenden Sekundärelektronen verzichtet werden, da deren Reichweite in Natriumiodid im Bereich von 1 mm gegenüber der Detektorausdehnung vernachlässigbar klein ist.

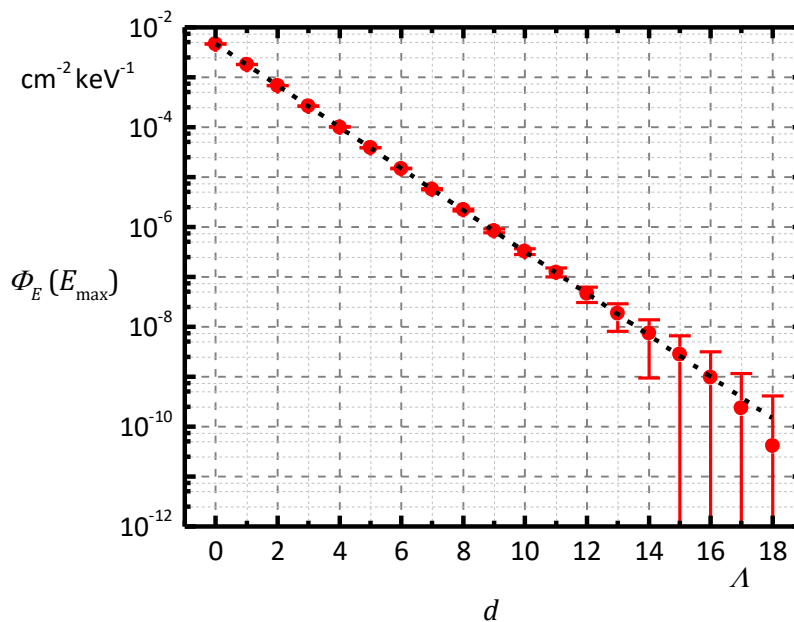


Abbildung 29: Spektralen Fluenzen $\Phi_E(E_{\max})$ für 10^8 Quellphotonen mit $E_{\max} = 661,7$ keV in Abhängigkeit der Absorbertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\lambda = \lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich der Standardunsicherheit)

In Abbildung 29 ist der Mittelwert über alle spektralen Fluenzen $\Phi_E(E_{\max})$ der zehn Simulationen mit $E_{\max} = 661,7$ keV dargestellt. Bis zu einer Tiefe von $d = 18 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ liefert mindestens eine aus 10^8 Historien einen Detektorbeitrag, wodurch sich ein eindeutig exponentieller Zusammenhang nach

$$\Phi_E(d, E_{\max}) = \Phi_E(0, E_{\max}) \cdot e^{-d/[\Lambda_t(E_{\max}) \cdot (1,0365 \pm 0,0005)]}, \quad (87)$$

ergibt. Die so gemessene mittlere freie Weglänge von $\Lambda_t(E_{\max}) \cdot (1,0365 \pm 0,0005)$ unterscheidet sich signifikant vom erwarteten Wert um $(3,65 \pm 0,05)\%$. Hierbei wird jedoch davon ausgegangen, dass jedes im Absorber wechselwirkende Photon den Detektor gegebenenfalls nur noch mit einer Energie kleiner E_{\max} erreichen kann. Streuungen um kleine Winkel führen jedoch zu zusätzlichen Beiträgen, wodurch sich die spektrale Fluenz vergrößert. Dieser Effekt wird auch als Aufbaueffekt bezeichnet [124] und $1,0365 \pm 0,0005$ ist der dazugehörige Aufbaufaktor.

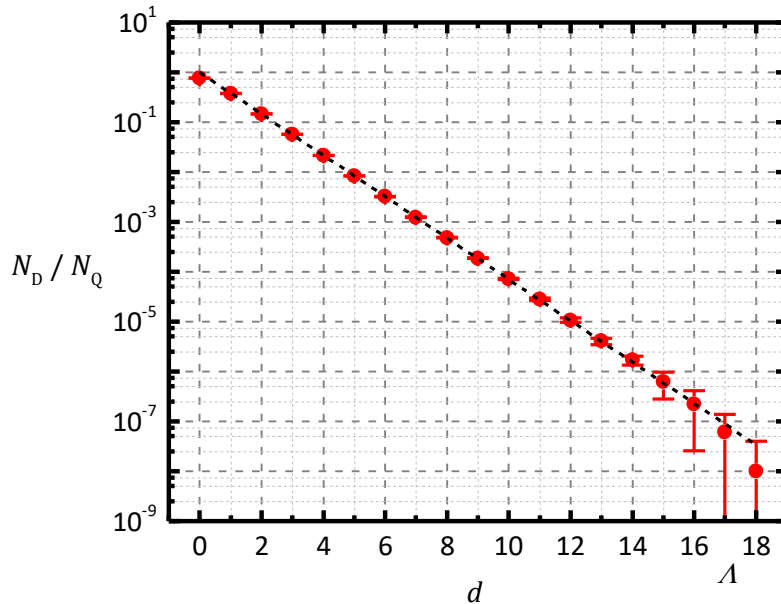


Abbildung 30: Mittlere Anzahl N_D an Detektorbeiträgen liefernden Historien aus zehn Simulationen (je $N_Q = 10^7$ Quellphotonen) in Abhängigkeit der Absorbiertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

Das exponentielle Schwächungsgesetz kann bis zu einer Tiefe von $d = 16 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ nachgewiesen werden. Für größere Absorbieriefen weicht die berechnete spektrale Fluenz zu kleineren Werten hin ab und verschwindet ab $d = 18 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ ganz. Weiterhin wird deutlich, dass gleichzeitig die Standardunsicherheit mit zunehmender Tiefe ansteigt. Die Ursache für diese Effekte liegt in der exponentiell sinkenden mittleren Anzahl N_D an Historien, welche im Rahmen der analogen Monte Carlo Methode einen Detektorbeitrag liefern. Diese ist in Abbildung 30 skaliert auf die Anzahl N_Q simulierter Quellphotonen dargestellt. Je größer die Absorbiertiefe, desto mehr Nullbeiträge werden gezählt.

Folglich nähert sich die Standardunsicherheit dem Mittelwert an und kann diesen aufgrund von statistischen Schwankungen sogar übersteigen. Für Absorbertiefen größer $d = 18 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ gilt $N_D = 0$, denn entsprechend der exponentiellen Schwächung erreicht im Mittel weniger als eines von 10^8 Quellphotonen den Detektor.

Wenn kein Absorber vorhanden ist ($d = 0$), so beträgt die mittlere Anzahl an beitragenden Historien $N_D = (7,593 \pm 0,001) \cdot 10^6$. Folglich beträgt die Wahrscheinlichkeit, dass ein senkrecht auf den NaI(Tl)-Detektor treffendes Photon der Energie 661,7 keV einer Wechselwirkung im Detektor unterliegt, $(75,93 \pm 0,01)\%$. Der gleiche Wert ergibt sich aus dem exponentiellen Schwächungsgesetz mit einer mittleren freien Weglänge von 3,565 cm entsprechend der EPDL97 [123], welche die Grundlage für die Wechselwirkungsdaten in AMOS bildet [59].

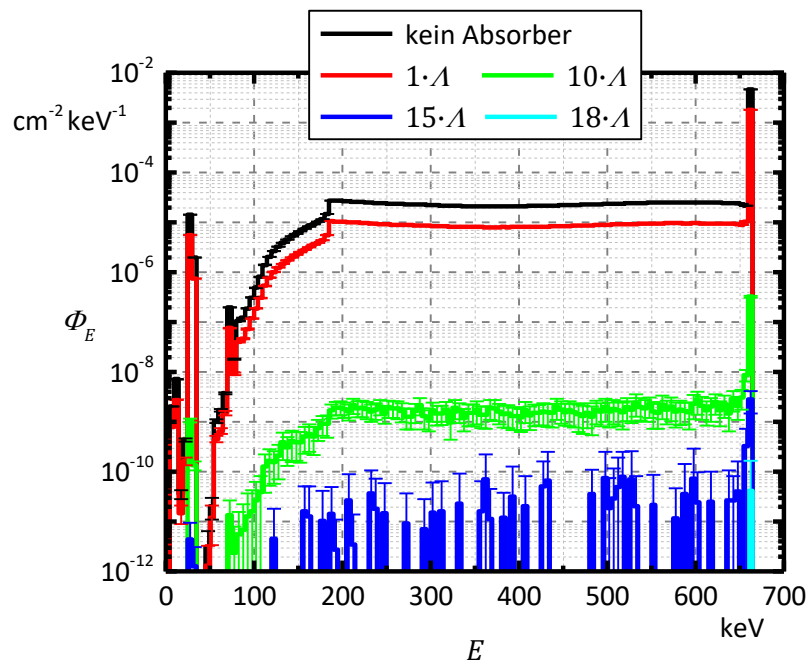


Abbildung 31: Spektrale Fluenz Φ_E in Abhängigkeit der Photonenenergie E für 10^8 Quellphotonen für ausgewählte Absorbertiefen mit $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

Die berechnete spektrale Fluenz Φ_E ist in Abbildung 31 dargestellt. Das Ergebnis bezieht sich auf insgesamt 10^8 Quellphotonen. Die Verteilung ist dominiert von einem Peak bei der Energie E_{\max} , dessen Wert in etwa zwei Größenordnungen oberhalb des sich zu niedrigeren Energien anschließenden Kontinuums liegt. Dieses Kontinuum ist nahezu konstant und wird durch inkohärent gestreute Photonen gebildet. Der maximale Energieverlust beträgt hierbei 477,3 keV [8]. Bedingt durch das stärkere Anwachsen des Wirkungsquerschnitts für Photoeffekt bei niedrigen Energien, ist mehrfache inkohärente Streuung innerhalb des Detektors weniger wahrscheinlich. Daher bildet sich bei $E = 184,3$ keV eine deutliche Kante aus, gefolgt von einem stark abfallenden Kontinuum.

Außerdem wird charakteristische Röntgenstrahlung als Folge von Abregungsprozessen im NaI(Tl)-Detektor emittiert. Dazu gehören die Iod- K_α -Linien bei 28,6 keV und 28,3 keV (Übergangswahrscheinlichkeit von 72,6%), die Iod- K_β -Linien bei 32 keV (22,7%), die Thallium- K_α -Linien bei 71,1 keV und 73,1 keV (75,6%), die Thallium- K_β -Linien um 83 keV (9,4%) und die Thallium- L_β -Linien bei 12 keV (6,8%) [125]. Alle Linien sind in der spektralen Verteilung erkennbar.

Je größer die Absorbertiefe, desto weniger Historien liefern einen Detektorbeitrag. Dadurch ist auch die spektrale Fluenz stärkeren statistischen Schwankungen unterlegen. Während in der Verteilung bei $d = 15 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ noch einzelne Beiträge zu erkennen sind, reduzieren sich diese bei $18 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ auf nur einen einzigen.

Der Verlauf der spektralen Verteilung ändert sich nur geringfügig mit größer werdender Absorbertiefe. Für kleine Absorbertiefen erreichen aufgrund der großen Entfernung nur wenige gestreute Photonen den Detektor. Je größer die Tiefe des Absorbers wird, desto größer ist die Wahrscheinlichkeit, dass solche Photonen durch Photoeffekt im Absorber absorbiert werden. Folglich wird die spektrale Fluenz im Detektor hauptsächlich durch transmittierte oder kohärent gestreute Photonen der Energie $E_{\max} = 661,7$ keV bestimmt. Das Verhältnis zwischen Peak und Kontinuum ist konstant. Das exponentielle Schwächungsgesetz gilt demnach auch für die Fluenz Φ , Abbildung 32.

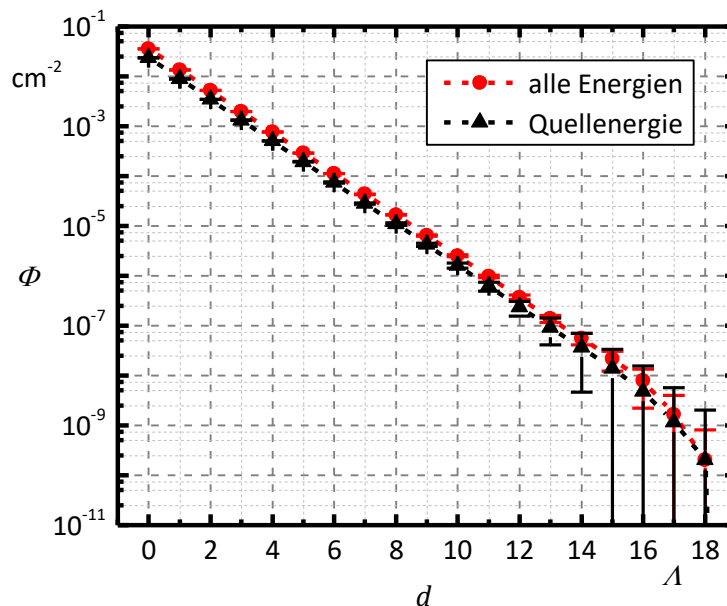


Abbildung 32: Fluenzen Φ für 10^8 Quellphotonen in Abhängigkeit der Absorbertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

Für den späteren Vergleich mit effizienzsteigernden Methoden ist letztendlich die benötigte Simulationszeit der analogen Methode entscheidend. Zur Einschätzung der Effizienzsteigerung wird die FOM verwendet. Nach Gleichung (53) ist diese das Inverse des Produkts aus Simulationszeit t und

dem Quadrat der relativen Standardunsicherheit der Fluenz Φ . Da die Simulationszeit immer vom verwendeten Computersystem abhängt, ist nicht der Wert der FOM entscheidend, sondern die Veränderung durch Verwendung von effizienzsteigernden Methoden.

In Abbildung 33 ist die benötigte Simulationszeit pro Lebensgeschichte als Mittelwert über zehn Simulationen mit jeweils 10^7 Historien in Abhängigkeit der Absorbertiefe dargestellt. Es ergibt sich ein exponentieller Verlauf, welcher ab $d \geq 6 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ in Sättigung bei etwa 0,15 ms geht. Eine Leistungsanalyse des Simulationsprogramms AMOS zeigt, dass die Rechenzeit hauptsächlich durch die Anzahl an Aufrufen der Geometrie zur Bestimmung des Teilchenorts nach jedem Transportschritt und durch die Berechnung der Abregungsprozesse in Folge von Vakanzen bestimmt wird. Vakanzen entstehen durch Photoeffekt und inkohärente Streuung. Je größer die Absorbertiefe, desto mehr Wechselwirkungen finden statt und desto mehr Vakanzen werden erzeugt. Dies wird durch die Vergrößerung der Photoeffektwahrscheinlichkeit bei niedrigen Energien verstärkt. Hinzu kommt, dass der Anteil an Historien, welche den Detektor erreichen, exponentiell abnimmt (Abbildung 30). Für $d \geq 6 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ beträgt dieser weniger als ein Tausendstel. Folglich wird der Hauptteil der Rechenzeit zur Simulation der Prozesse im Absorber verwendet. Die Simulationszeit wird dadurch unabhängig von der Absorbertiefe.

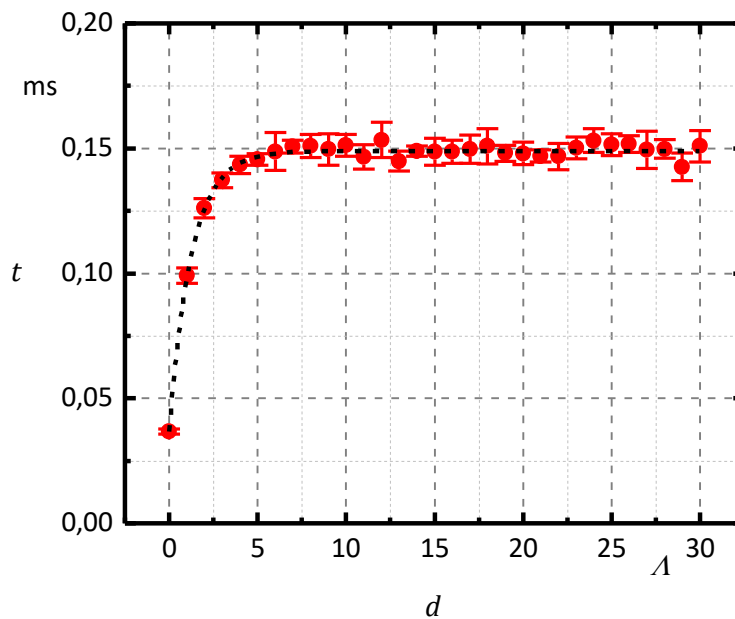


Abbildung 33: Mittlere Simulationszeit t pro Historie aus zehn Simulationen (je 10^7 Quellphotonen) in Abhängigkeit der Absorbertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

Die Abhängigkeit der FOM von der Absorbertiefe ergibt sich aus dem Verlauf der Simulationszeit t und der relativen Standardunsicherheit R der Fluenz Φ . Für R kann jedoch keine Standardunsicherheit angegeben werden, da hierfür die Varianz der Varianz bzw. das vierte Moment der Verteilung benötigt wird. Da dessen Berechnung vergleichsweise aufwändig ist, wird dies nicht von AMOS

durchgeführt. Alternativ wird in dieser Arbeit jede Simulation zehn Mal wiederholt. Die Effizienz der Simulation ist dann die mittlere FOM und deren Standardunsicherheit die Standardunsicherheit des Mittelwerts. Für $d = 18 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ liefert nur eine der zehn Simulationen ein Ergebnis. Die Angabe einer Standardunsicherheit ist daher nicht möglich. Die FOM sinkt erwartungsgemäß exponentiell, da die mittlere Anzahl N_D an beitragenden Historien exponentiell abfällt.

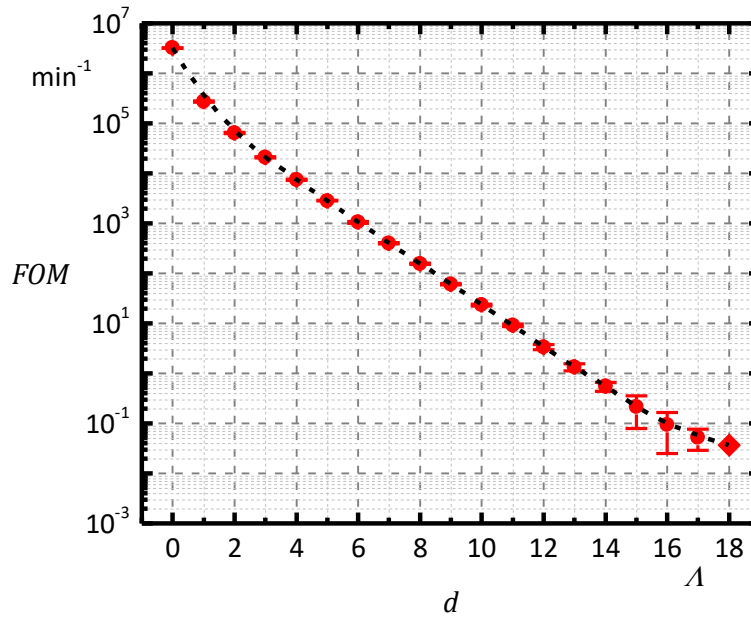


Abbildung 34: Mittlere FOM aus zehn Simulationen (je 10^7 Quellphotonen) in Abhängigkeit der Absorbertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

4.1.3 implizite Absorption

Die definierte Problemstellung der tiefen Durchdringung wird im Folgenden mit Hilfe der Methode implizite Absorption im Rahmen nicht-analoger Monte Carlo Methoden bearbeitet. Zentrales Element ist dabei das Teilchengewicht, welches nun nicht mehr konstant ist. Durch den Einsatz von implizitem Photoeffekt wird das Gewicht während einer Teilchenhistorie fortlaufend verringert. Um numerische Probleme bei der Behandlung sehr kleiner Gleitkommazahlen zu vermeiden, muss eine untere Gewichtsgrenze als zusätzliche Abbruchbedingung gesetzt werden. Für die folgenden Ergebnisse beträgt diese $w_{\text{cut}} = 1 \cdot 10^{-100}$.

Eine direkte Folge des Photoeffekts ist das Auftreten einer Vakanz. Die Berechnung der dadurch verursachten Abregungsprozesse benötigt in AMOS einen Hauptteil der Rechenzeit. Da wegen impliziter Absorption der Photoeffekt bei jedem Wechselwirkungspunkt erfolgt, ist eine starke Erhöhung der Rechenzeit gegenüber der analogen Monte Carlo Methode zu erwarten. Dies wird in Abbildung 35 bestätigt, welche die mittlere Simulationszeit pro Historie zeigt.

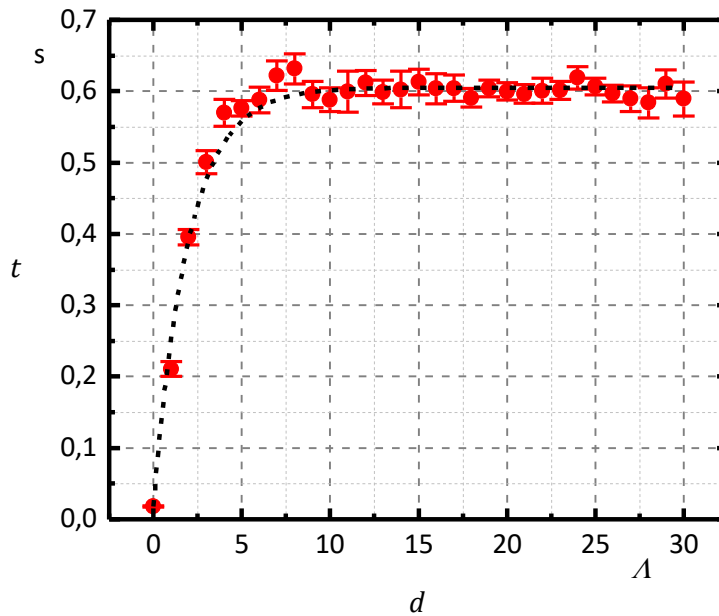


Abbildung 35: Mittlere Simulationszeit t pro Historie aus zehn Simulationen (je $4 \cdot 10^3$ Quellphotonen) in Abhängigkeit der Absorbertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

Auch hier erreicht der Verlauf ab $d \geq 6 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ einen Sättigungswert. Dieser ist jedoch mit 0,6 s etwa 4000 Mal größer als bei analoger Simulation. Dieser Faktor wird durch die mittlere Anzahl an erzeugten Vakanzen bestimmt, welche von etwa 21 auf 94330 pro Historie ansteigt.

Aufgrund der größeren Rechenzeit werden pro Simulation nur $4 \cdot 10^3$ Historien berechnet. Die benötigte Zeit, um alle Simulationen abzuschließen beträgt dadurch in etwa eine Woche. Wenn auch hier 10^8 Quellphotonen transportiert werden sollten, so betrüge die Rechenzeit mehr als 50 Jahre. In Abbildung 36 ist die FOM der Simulationen mit impliziter Absorption dargestellt. Die 4000 Mal größere Simulationszeit sorgt für eine entsprechende Verschlechterung der Effizienz um drei Größenordnungen. Für $d = 11 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ liefert nur eine der zehn Simulationen ein Ergebnis. Die Angabe einer Standardunsicherheit ist daher nicht möglich.

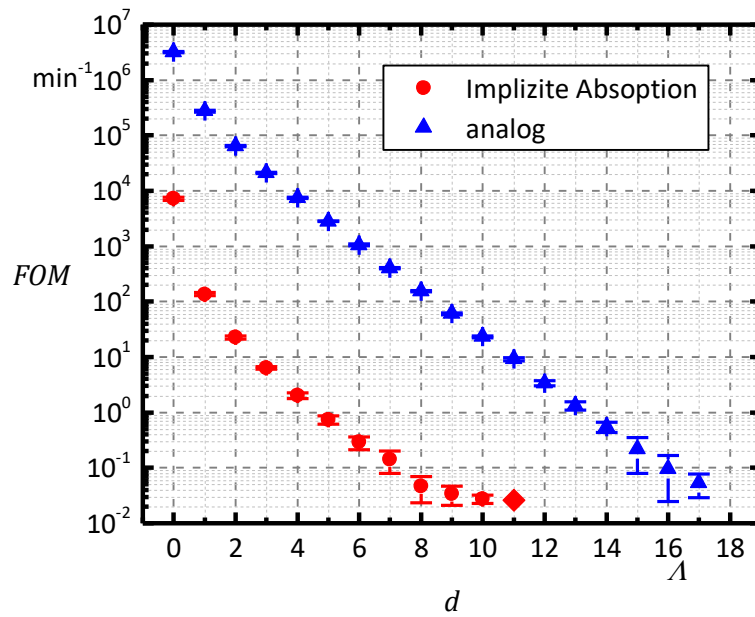


Abbildung 36: FOM aus zehn Simulationen (je $4 \cdot 10^3$ Quellphotonen) in Abhängigkeit der Absorbertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\lambda = \lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

Die Ursache für diese Effizienzverkleinerung wird im Folgenden dargelegt. In Abbildung 37 zeigt die mittlere Anzahl N_D an Historien, welche einen Detektorbeitrag liefern, skaliert auf die Anzahl N_Q simulierter Quellphotonen. Zum Vergleich sind die entsprechenden Werte der analogen Monte Carlo Methode eingetragen. Im Rahmen der Messabweichung sind die Ergebnisse identisch. Folglich sorgt implizite Absorption nicht für eine Vergrößerung der Anzahl beitragender Historien, obwohl die Teilchen aufgrund der Gewichtsreduktion länger überleben.

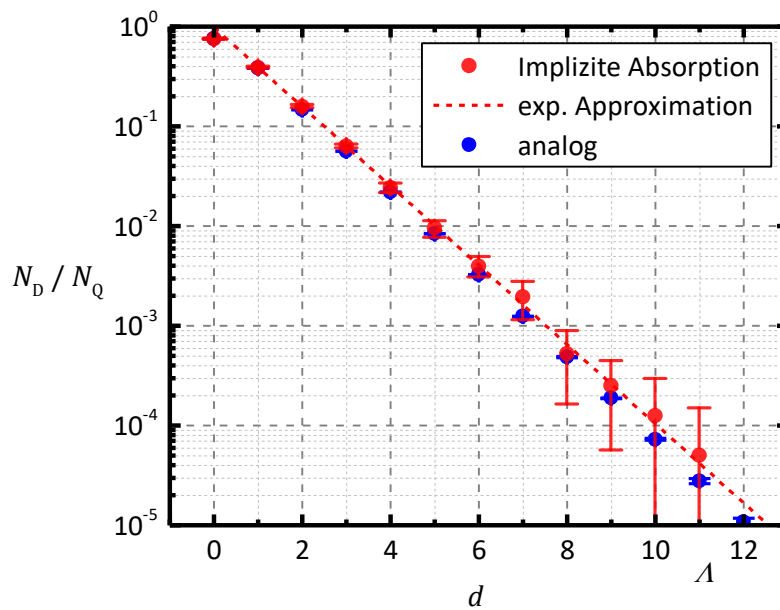


Abbildung 37: Mittlere Anzahl N_D an Detektorbeitrag liefernden Historien aus zehn Simulationen (je $N_Q = 10^7$ Quellphotonen für analog und $N_Q = 4 \cdot 10^3$ Quellphotonen für implizite Absorption) in Abhängigkeit der Absorbertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

Die Ursache für dieses Verhalten liegt in der Photonenbewegung im Absorber bei kleinen Energien, welche einer Brownschen Bewegung [126] ähnelt. Abbildung 38 zeigt die xz -Projektion des zurückgelegten Pfads von zehn Quellphotonen. Die Eindringtiefe in den Absorber beträgt nur wenige Zentimeter. Infolge von inkohärenten Streuungen verringert sich die Energie nach einigen Wechselwirkungen auf unterhalb 100 keV. In diesem Energiebereich dominieren kohärente Streuung und Photoeffekt. Folglich kommt es zu häufigen Richtungsänderungen bei gleichzeitiger Verringerung des Gewichts. Die Energie verkleinert sich nur noch geringfügig, Abbildung 39, und die Simulation wird durch das Unterschreiten der Gewichtsgrenze w_{cut} abgebrochen. Durch das Herabsetzen dieser Grenze wird die ungeordnete Bewegung lediglich verlängert und führt nicht zu einer größeren Eindringtiefe (Abbildung 38, unten).

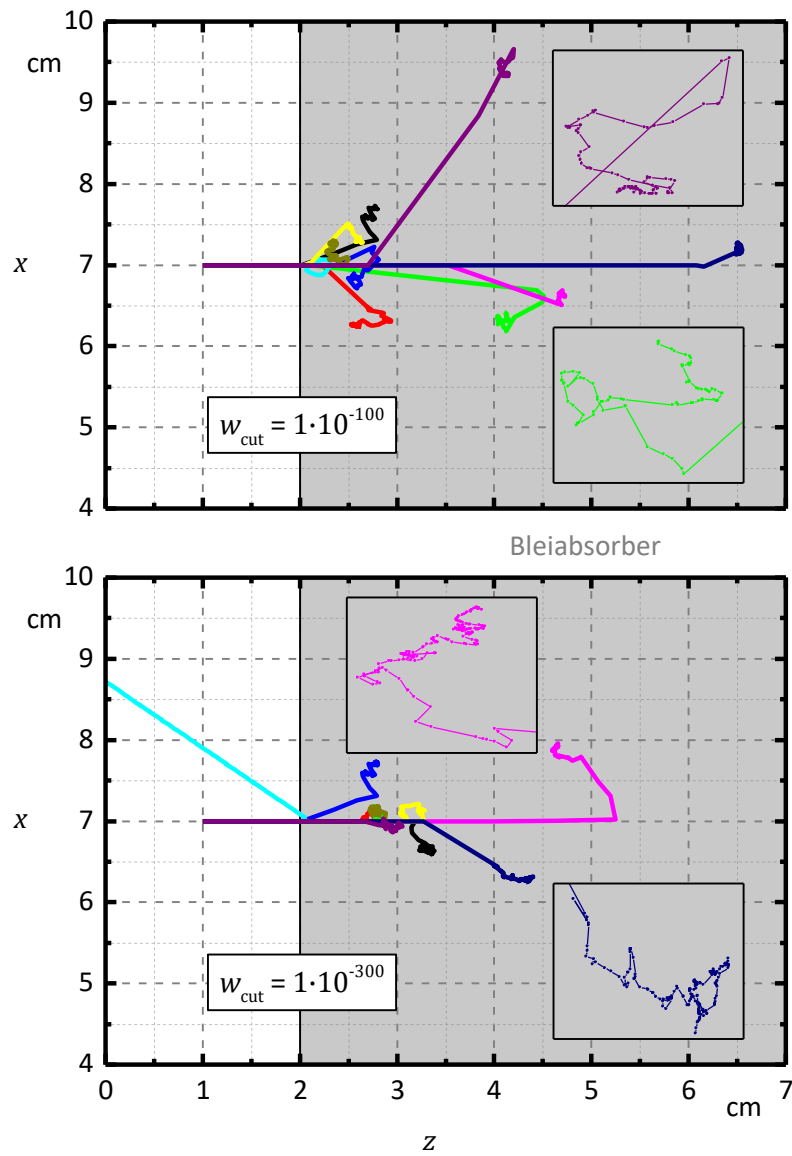


Abbildung 38: xz -Projektionen zurückgelegter Pfade von zehn Quellphotonen im Rahmen einer nicht-analogen Monte Carlo Simulation mit impliziter Absorption und unterschiedlichen unteren Gewichtsgrenzen w_{cut}

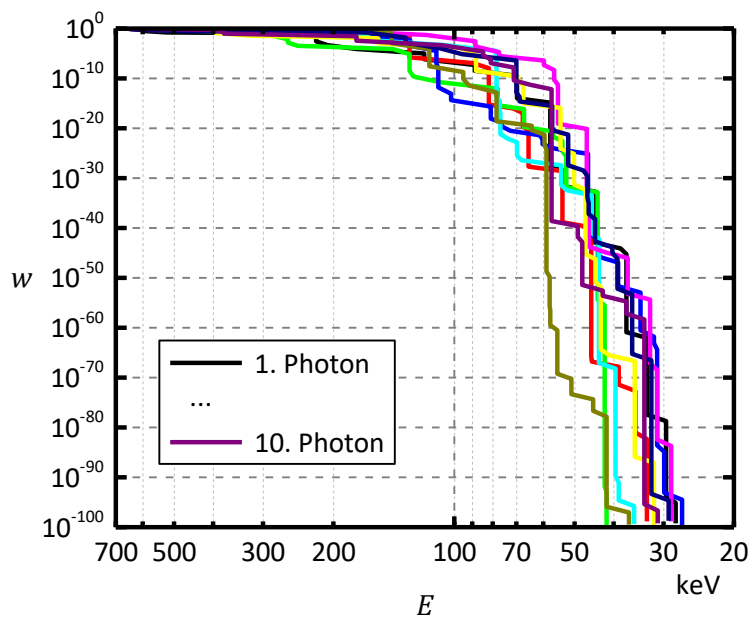


Abbildung 39: Teilchengewicht w der zehn Quellphotonen aus Abbildung 38 mit $w_{\text{cut}} = 1 \cdot 10^{-100}$ in Abhängigkeit Photonenenergie E

Die berechnete spektrale Fluenz Φ_E ist in Abbildung 40 dargestellt. Das Ergebnis bezieht sich auf insgesamt $4 \cdot 10^4$ Quellphotonen. Im Rahmen der Messabweichung stimmen die Spektren mit denen der analogen Simulation überein.

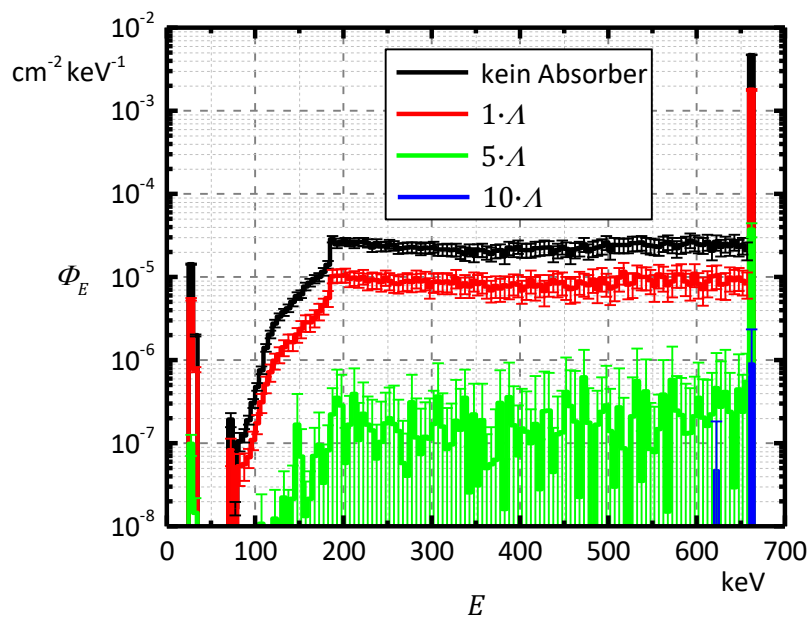


Abbildung 40: Spektrale Fluenz Φ_E in Abhängigkeit der Photonenenergie E für $4 \cdot 10^4$ Quellphotonen für ausgewählte Absorbertiefen (99,73% Vertrauensbereich)

4.1.4 Gewichtsfenstergenerator

Der bisherige Vergleich zwischen der analogen Monte Carlo Methode und der Simulation mit impliziter Absorption zeigt, dass hauptsächlich solche Photonen Beiträge liefern, die ohne Wechselwirkung durch den Absorber gelangen oder nur um kleine Winkel kohärent oder inkohärent gestreut werden. Die Aufgabe der Gewichtsfenstertechnik ist es daher, einerseits tief in den Absorber eindringende Teilchen durch Splitting zu vervielfältigen und andererseits Lebensgeschichten von unter großem Winkel gestreuten Photonen frühzeitig durch Russisch-Roulette zu beenden. Wie die Gewichtsfenstergrenzen gesetzt werden müssen, um dieses Ziel zu erreichen, wird mit Hilfe des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Gewichtsfenstergenerators berechnet.

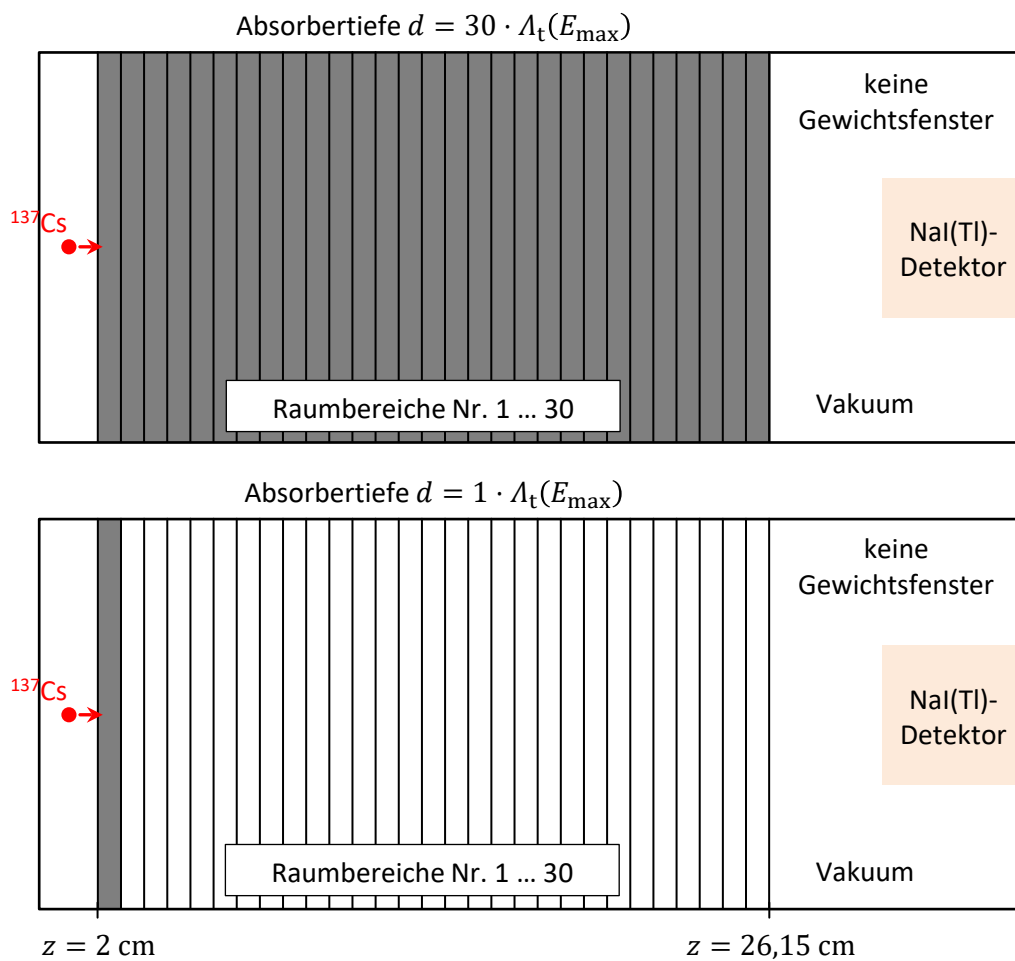


Abbildung 41: Schnitte bei $x = 7,0 \text{ cm}$ durch die Geometrie des Problems der tiefen Durchdringung für Photonenstrahlung des Isotops ^{137}Cs mit einem Bleiabsorber der Tiefe von $30 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ (oben) und von $1 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ (unten)

Für die Absorbertiefe $d = 30 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ wird dazu der Bleiabsorber entlang der z -Achse in Schichten der Tiefe von einer mittleren freien Weglänge $\Lambda_t(E_{\max})$ mit $E_{\max} = 661,7 \text{ keV}$ unterteilt. Dies ist in Abbildung 41 (oben) dargestellt. Diese Schichten bilden insgesamt 30 Raumbereich, in denen der Teilchenwert geschätzt wird.

Aus den Teilchenwerten können anschließend die Überlebensgewichte w_s durch Skalierung berechnet werden. Die Skalierung erfolgt mit Hilfe des Teilchenwerts einer kleinen Zelle, welche die punktförmige Quelle umgibt. Dadurch liegt das Quellgewicht immer innerhalb eines Gewichtsfensters. Zunächst werden dabei nur energieunabhängige Fenster betrachtet.

Die so definierte Unterteilung der Geometrie wird auch für kleinere Absorbertiefen beibehalten. Somit besitzt auch die Geometrie mit $d = 1 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ 30 Zellen zwischen Quelle und Detektor, was in Abbildung 41 (unten) dargestellt ist.

Bei der bisher verwendeten analogen Monte Carlo Methode gelangen ab einer bestimmten Absorbertiefe praktisch keine Teilchen mehr zum Detektor. Gleiches gilt für die Simulation mit impliziter Absorption. Folglich kann mit diesen Verfahren auch kein Teilchenwert berechnet werden. Ein Ausweg bietet jedoch folgendes Vorgehen. Zuerst wird die Teilchenwert in der Geometrie mit $d = 1 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ auf der Grundlage der analogen Monte Carlo Methode geschätzt. Die damit berechneten Gewichtsfenster werden anschließend in der Geometrie mit $d = 2 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ eingesetzt. Hier kann der Teilchenwert jetzt mittels nicht-analoger Monte Carlo Methoden mit impliziter Absorption und Gewichtsfenstertechnik ermittelt werden. Dies wird anschließend sukzessive für die verbleibenden Absorbertiefen bis $d = 30 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ fortgesetzt.

Auf diese Weise ist es möglich, Detektorergebnisse für alle Tiefen zu berechnen und dabei die Gewichtsfenster iterativ zu setzen. Die Fenstergrenzen werden gesetzt, wenn eine festgelegte obere Schranke R_{\max} für die Standardunsicherheit der zu ermittelnden Teilchenwerte erreicht ist. Der Einfluss von R_{\max} auf die Effizienz der berechneten Gewichtsfenster ist in Anhang F dargestellt. Das Ergebnis ist $R_{\max} = 30\%$ als größtmöglicher Wert, bei dem die statistische Schwankung der Fenstergrenzen die Effizienz nicht signifikant beeinflusst.

R_{\max} unterscheidet sich von einer benutzerseitig gewählten wählbaren Schranke für die Standardunsicherheit der spektralen Fluenz. Für die Simulation mit AMOS kann der Benutzer wählen, welche der beiden oberen Schranken das Abbruchkriterium bildet. Dabei wird zwischen iterativer und kombiniert-iterativer Berechnung der Gewichtsfenster unterschieden. Im ersten Fall wird bei Erreichen von R_{\max} abgebrochen. Im letzten Fall hingegen steht die Messabweichung der spektralen Fluenz oder der spektralen Energiedeposition im Fokus. Der Anwender hat auch die Möglichkeit, die Fenster direkt (nicht-iterativ) berechnen zu lassen.

Für die folgenden Berechnungen wird der kombiniert-iterative Generator gewählt. Die Simulation erfolgt solange, bis die von AMOS berechnete Standardunsicherheit der spektralen Fluenz unter 10% (99,73% Vertrauensbereich) gefallen ist. Da sich diese Größe nicht nur auf einen einzelnen Zahlenwert bezieht, werden in AMOS die Standardunsicherheiten für alle Energiegruppen zunächst nach der Größe beginnend bei der kleinsten sortiert. Anschließend wird der Mittelwert von den ersten 75% dieser Werteliste berechnet. Das Ergebnis gilt als Maß für die Standardunsicherheiten des Spektrums.

Vom Generator werden lediglich die Überlebensgewichte w_S vorgegeben. Für die Wahl der oberen w_U und der unteren Gewichtsfenstergrenze w_L gilt zunächst der in dieser Arbeit bereits diskutierte Ansatz symmetrischer Grenzen $w_U = 2 \cdot w_S$ und $w_L = 0,5 \cdot w_S$. Welchen Einfluss dieser auf die Effizienz hat, wird in Anhang F betrachtet. Das Ergebnis ist, dass ein Verhältnis $w_U/w_L = 1,2$ für energieunabhängige, symmetrische Fenstergrenzen eine um etwa 20% größere Effizienz erzielt. Folglich wird dieses für die folgenden Simulationen verwendet.

In Abbildung 42 ist das Detektorergebnis der Simulationen mit energieunabhängigem, kombiniert-iterativem Generator für alle Tiefen des Absorbers dargestellt. Der Vergleich mit den analogen Simulationen zeigt, dass die Resultate bis zu einer Tiefe von $16 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ im Rahmen der Standardunsicherheit übereinstimmen. Wie erwartet, setzt sich die exponentielle Abhängigkeit fort.

In Abbildung 43 wird die Fluenz $\Phi(E_{\max})$ der Quellenergie im Detektor mit der integralen Fluenz Φ aller Energien verglichen. Schon die Ergebnisse aus der analogen Simulation zeigen, dass beide dem gleichen exponentiellen Verhalten folgen (Abbildung 32). Bei Tiefen von mehr als $25 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ weicht die Fluenz Φ jedoch signifikant hin zu größeren Werten ab. Dieses Verhalten wird ebenfalls als Aufbaueffekt bezeichnet [124]. Die Ursache liegt in einer Verschiebung des Kontinuums der spektralen Fluenz hin zum Peak. Dies ist in Abbildung 44 dargestellt.

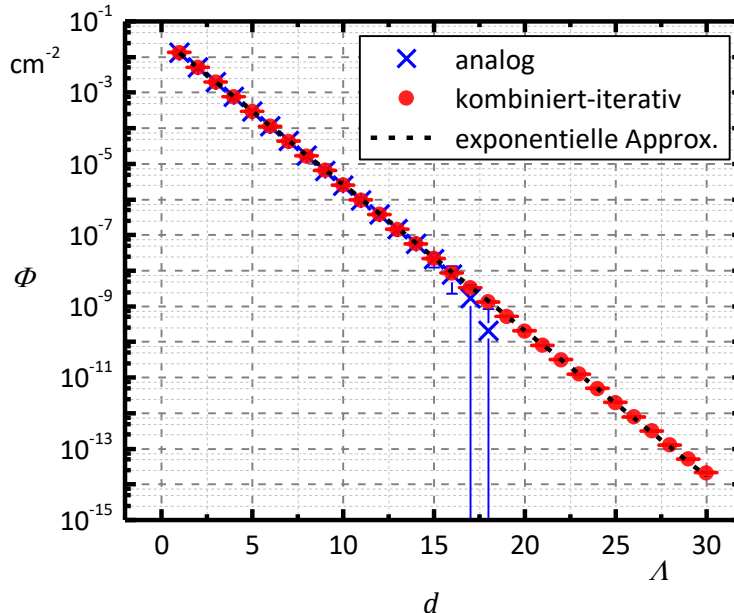


Abbildung 42: Fluenz Φ aus zehn Simulationen in Abhängigkeit der Absorbierertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

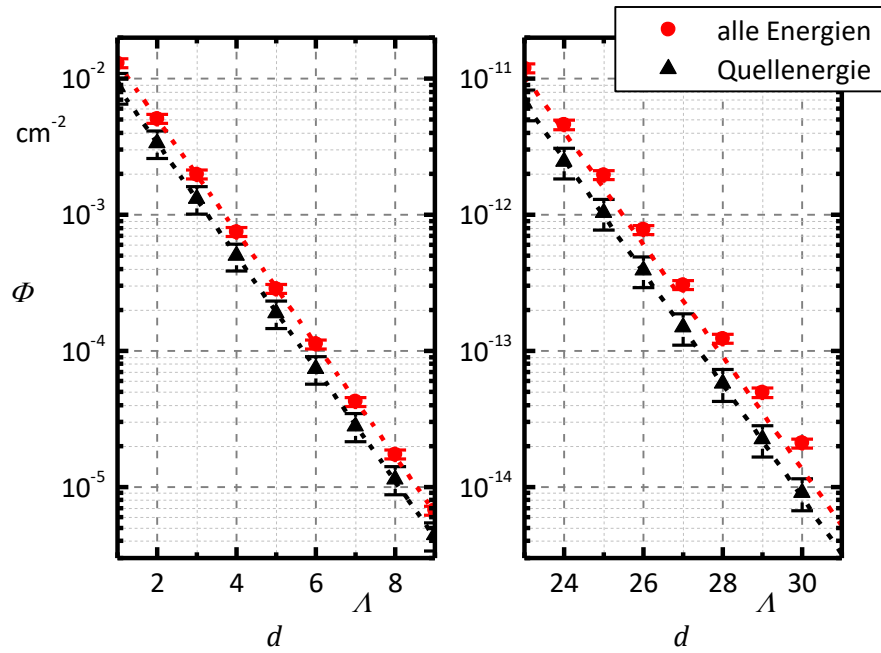


Abbildung 43: Fluenzen Φ aus kombiniert-iterativer Simulation in Abhängigkeit der Absorbertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\lambda = \lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

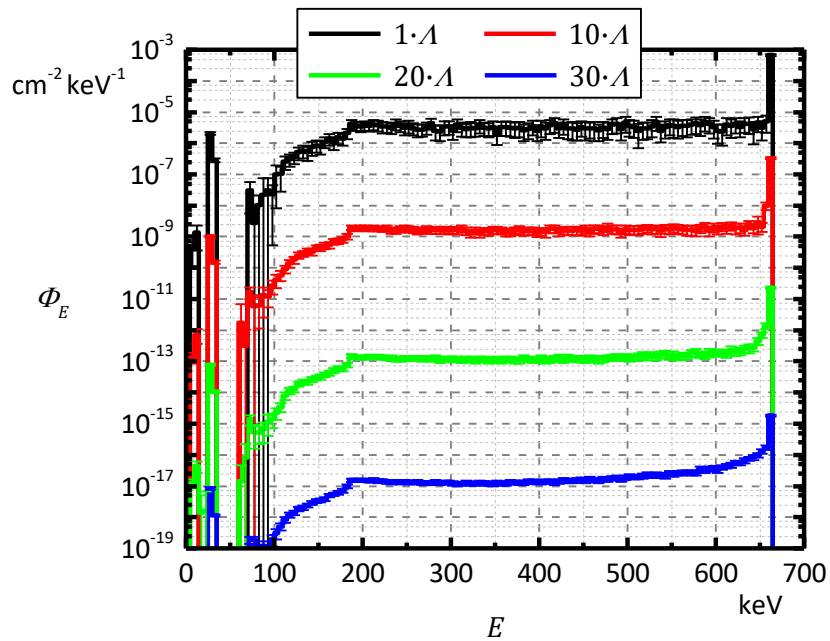


Abbildung 44: Spektrale Fluenz Φ_E in Abhängigkeit der Photonenenergie E für ausgewählte Absorbertiefen und $\lambda = \lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

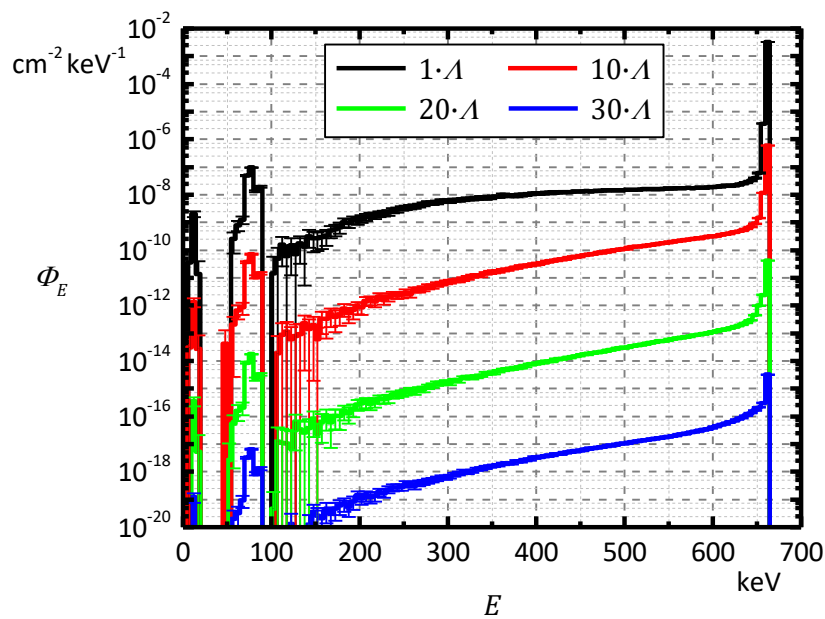


Abbildung 45: Spektrale Fluenz Φ_E der auf den Detektor treffenden Photonen in Abhängigkeit der Photonenenergie E für ausgewählte Absorbertiefen und $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

Bei großen Absorbertiefen ist der Abstand zwischen Absorber und Detektor so klein, dass die Ausdehnung des Detektors signifikant wird. Die Forderung des exponentiellen Schwächungsgesetzes, dass nur ungestreute Photonen auf den Detektor treffen, kann nicht mehr annähernd erfüllt werden. Dieser Sachverhalt wird durch die spektrale Fluenz der auf den Detektor treffenden Photonen bewiesen, welche in Abbildung 45 dargestellt ist. Während die Fluenz der Quellenergie E_{\max} bei einem dünnen Absorber noch etwa drei Größenordnungen größer als das Kontinuum ist, misst sie bei $d = 30 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ nur noch das Doppelte.

Die Ergebnisse zeigen, dass es erst mit Hilfe des Gewichtsfenstergenerators gelingt, die Problemstellung der tiefen Durchdringung zu lösen. Analoge Methoden scheitern an dieser Aufgabe. Ein weiterer Aspekt ist die dabei erzielte Steigerung der Effizienz, welche in Abbildung 46 dargestellt ist. Die Messgröße FOM ergibt sich dabei als Mittelwert aus zehn Simulationen. Das Abbruchkriterium ist immer das Erreichen der von AMOS berechneten Standardunsicherheit von 10% (99,73% Vertrauensbereich) für die spektrale Fluenz.

Neben energieunabhängigen Fenstern werden auch energieabhängige berechnet. Dabei kommt der in dieser Arbeit entwickelte Algorithmus zur automatischen Vereinigung von Energiegruppen zum Einsatz. Die Einteilung erfolgt hierbei in sieben Energiegruppen mit $\Delta E = 100$ keV.

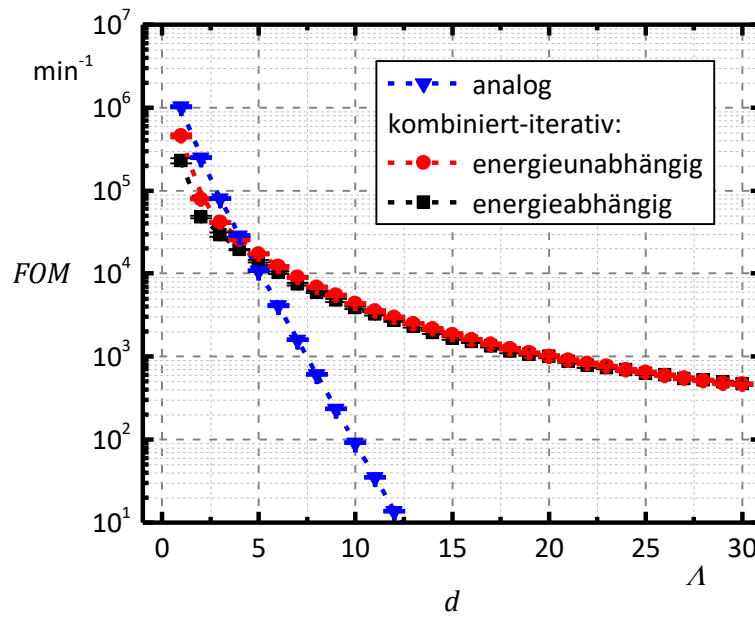


Abbildung 46: Mittlere FOM aus zehn Simulationen in Abhängigkeit der Absorbertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

Wie erwartet sinkt die Effizienz für alle Berechnungsmethoden mit steigender Absorbertiefe. Dabei ist die analoge Simulation bis zu einer Tiefe von $d = 4 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ die effizienteste Methode. Für $d = 1 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ ist die FOM mehr als doppelt so groß, wie die der kombiniert-iterativen Berechnung. Mit jeder Vergrößerung des Absorbers fällt der Wert jedoch exponentiell ab, während die Simulationen mit Generator scheinbar auf einen Grenzwert zustreben. Bei $d = 12 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ beträgt die Effizienz nur noch 0,46% (Faktor 217). Folglich sind Simulationen unterstützt mit einem Gewichtsfenstergenerator ab $d = 6 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ überlegen.

Weiterhin zeigen die Ergebnisse, dass die energieunabhängige Berechnung insbesondere bei kleinen Absorbertiefen effizienter als die energieabhängige ist. Für größere Tiefen sind alle generatorgestützten Berechnungen praktisch gleich effizient. Die Ursache hierfür liegt in der zusätzlich benötigten Rechenzeit für das sukzessive Vereinigen der Energieintervalle. Dessen Ergebnis sind bei kleinen Absorbertiefen fast immer energieunabhängige Fenster. Die Anzahl an simulierten Lebensgeschichten ist zu gering, um die obere Schranke R_{\max} zu unterschreiten. Dies ändert sich nur geringfügig bei größeren Absorbertiefen, und sorgt für einen zusätzlichen Effizienzgewinn.

Mehr Informationen über die Energieabhängigkeit der Fenster können jedoch durch eine längere Berechnung mit Hilfe des iterativen Generators gewonnen werden. Beispielsweise ergibt sich nach 10^9 Quellteilchen der in Abbildung 47 dargestellte Verlauf des Überlebensgewichts w_S in verschiedenen Schichten des $30 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ tiefen Absorbers.

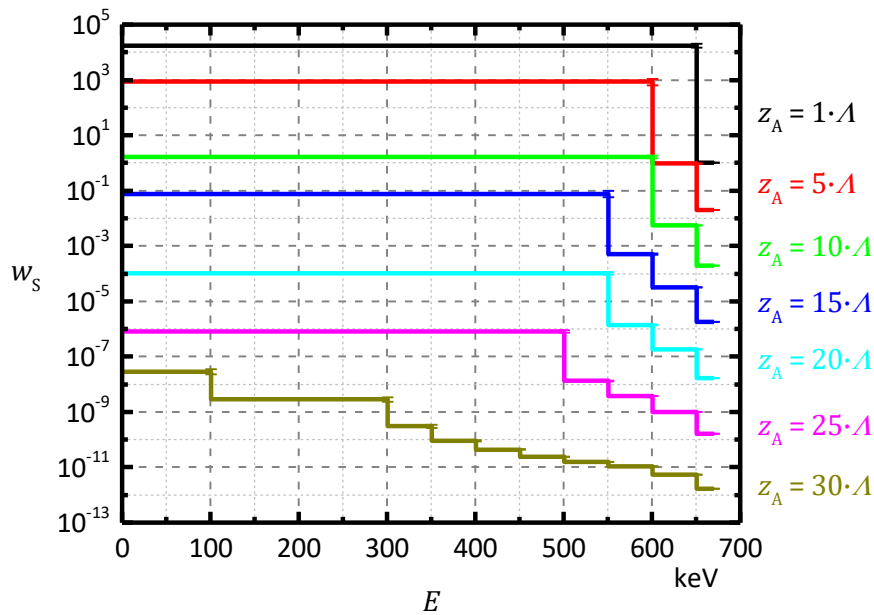


Abbildung 47: Energieabhängige Überlebensgewichte w_s in verschiedenen Schichten innerhalb des Absorbers in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\lambda = \lambda_t(E_{\max})$ für eine Absorbertiefe $d = 30 \cdot \lambda_t(E_{\max})$ mit $R_{\max} = 10\%$ (99,73% Vertrauensbereich)

Die Energieabhängigkeit variiert umso stärker, je kleiner der Abstand zum Detektor ist. Photonen im niederen Energiebereich aus den ersten Schichten des Absorbers sind für das Detektorergebnis unbedeutend. Hier ist das Überlebensgewicht um mehrere Größenordnungen größer, als im Bereich der Quellenergie E_{\max} . Aus der letzten Schicht erreicht ein signifikanter Anteil gestreuter Photonen den Detektor, was zu einer Verringerung von w_s führt.

Die Simulation mit bereits berechneten energieunabhängigen Fenstergrenzen erzielt eine Effizienz von $FOM = (319,3 \pm 2,5) \text{ min}^{-1}$. Werden hingegen die energieabhängigen Grenzen eingesetzt, so steigt die Effizienz auf $(3217 \pm 30) \text{ min}^{-1}$. Dies entspricht einem Effizienzgewinn von mehr als 700%. Folglich können im Vorhinein berechnete energieabhängige Fenster in eine weitere Verbesserung der Effizienz für das Problem der tiefen Durchdringung resultieren.

Die Berechnung der Fenster erzielt jedoch schon eine Standardunsicherheit der Fluenz von etwa 0,9‰ und nimmt etwa drei Tage Rechenzeit in Anspruch. Die Simulation mit energieabhängigen Gewichtsfenstern benötigt dann zwar nur etwa 6,5 h, um das gleiche Ergebnis zu erzielen, jedoch hat diese Verbesserung keine praktische Bedeutung, wenn die gestellte Simulationsaufgabe mittels Gewichtsfensterberechnung bereits gelöst ist. Dies wäre nicht der Fall, wenn die Simulation mehrfach wiederholt werden muss und beispielsweise verschiedene Detektortypen oder Detektorkonfigurationen hinter der Abschirmung von Interesse sind.

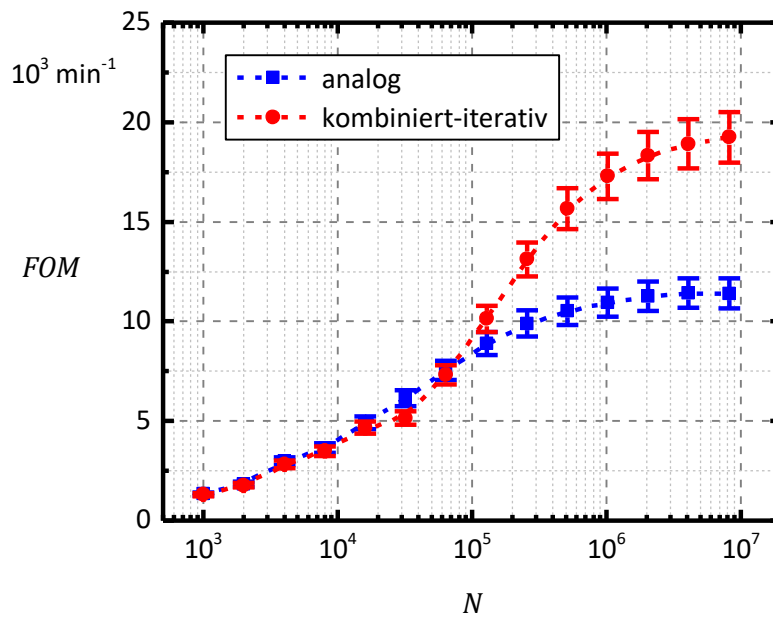


Abbildung 48: FOM in Abhängigkeit der bereits simulierten Anzahl N an Lebensgeschichten für eine Absorbertiefen von $d = 5 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

In Abbildung 48 wird die Arbeitsweise des Generators anhand eines Beispiels veranschaulicht. Dargestellt ist die Veränderung der Effizienz für einer Absorbertiefe von $d = 5 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ bei analoger und bei kombiniert-iterativer Simulation. Der energieunabhängige, iterative Generator startet dabei analog, ohne Gewichtsfenster. Bis zum Setzen des ersten Fensters für die erste Schicht bei $N \approx 2 \cdot 10^4$ verbessert sich die Effizienz im gleichen Maß. An dieser Stelle schaltet AMOS von analoger auf nicht-analoge Simulation um, was die FOM zunächst verkleinert. Die folgenden Iterationsschritte führen schließlich zu einer größeren Anzahl an gesetzten Gewichtsfenstergrenzen, wodurch die Effizienz stark ansteigt. In beiden Fällen strebt der Verlauf auf ein Plateau zu. In diesem Bereich sind sowohl die Standardunsicherheit der Fluenz als auch die Rechenzeit nur noch von der Anzahl N an Lebensgeschichten abhängig, wodurch die FOM entsprechend der Erwartung in Gleichung (56) N -unabhängig wird.

Letztendlich ist in Abbildung 49 das Generatorergebnis in Form der energieunabhängigen Überlebensgewichte w_s entlang der z -Achse der Geometrie für ausgewählte Absorbertiefen d dargestellt. Für alle Tiefen stimmen die Werte innerhalb des Absorbers überein. Da der Hauptteil der Detektorbeiträge von Photonen stammt, die ohne Wechselwirkung durch den Absorber gelangen oder nur um kleine Winkel gestreut werden, ist der Teilchenwert der Zellen außerhalb des Absorbers praktisch konstant. Ein Geometrieeffekt aufgrund des sich verkleinernden Abstands zwischen Absorber und Detektor ist nur andeutungsweise zu erkennen.

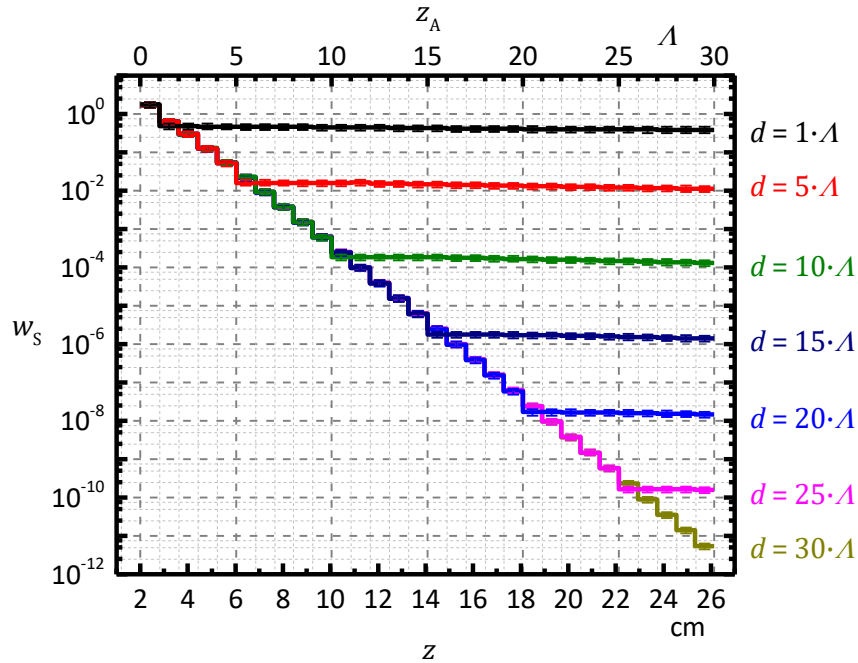


Abbildung 49: Überlebensgewichte w_s entlang der z -Achse (z – innerhalb der Geometrie, z_A – innerhalb des Absorbers in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\lambda = \lambda_t(E_{\max})$) für ausgewählte Absorbertiefen d mit $R_{\max} = 10\%$ (99,73% Vertrauensbereich)

Der Einsatz des Generators mit impliziter Absorption macht es möglich, die Problemstellung der tiefen Durchdringung zu lösen. Analoge Methoden scheitern hier. Im Rahmen einer kombiniert-iterativen Berechnung erfolgt die Verbesserung der Effizienz dabei automatisch. Außerdem sinkt dadurch die Rechenzeit ab einer Tiefe von $d = 8 \cdot \lambda_t(E_{\max})$ um mehr als eine Größenordnung.

Die Ergebnisse zeigen aber auch, dass die Verwendung eines energieabhängigen kombiniert-iterativen Generators in dieser Problemstellung keine signifikante Steigerung der Effizienz erzielt. Die Ursache liegt in der geforderten Genauigkeit der zu berechnenden spektralen Fluenz. Diese ist bereits erreicht, bevor eine Energieabhängigkeit der Fenstergrenzen signifikant angegeben werden kann. Dies zeigt sich dadurch, dass nur für wenige Raumbereiche energieabhängige Daten ausgegeben werden.

4.2 Gestreute Photonenstrahlung

Analoge Monte Carlo Methoden scheitern an der Berechnung der tiefen Durchdringung, da praktisch alle Photonen vor Erreichen des Detektors absorbiert werden. Erst die implizite Absorption zusammen mit der Gewichts Fensterfenstertechnik erzielt ein Ergebnis. Dabei werden solche Teilchen bevorzugt, die tief in den Absorber eindringen. Die Simulation rückgestreuter Photonen wird hingegen frühzeitig beendet.

In vielen Problemstellungen gibt es jedoch auch signifikante Beiträge von gestreuten Teilchen. Diese unterscheiden sich anhand ihrer Energie von den Primärteilchen. Folglich besteht prinzipiell die Möglichkeit, um den richtigen Winkel gestreute Teilchen mittels energieabhängiger Gewichts Fensterfenstertechnik zu bevorzugen. Um dies zu validieren, wird ein hypothetisches Streuexperiment im Anhang G betrachtet. Dabei wird gezeigt, dass mit Hilfe der Gewichts Fensterfenstertechnik auch Streuprobleme mit größerer Effizienz gelöst werden können.

Im Folgenden soll untersucht werden, ob sich dieses Ergebnis auch auf ein komplexes Anwendungsbeispiel übertragen lässt: die Simulation der Kalibrierung eines Personendosimeters. Das Dosimeter befindet sich hierbei vor einem Wasserphantom, wodurch ein Teil der Beiträge aus rückgestreuten Photonen resultiert.

4.2.1 Problemstellung

In der Arbeitsgruppe Strahlungsphysik am Institut für Kern- und Teilchenphysik der TU Dresden werden seit dem Jahr 2000 passive Dosimetriesysteme auf der Basis optisch stimulierter Lumineszenz entwickelt [127–130]. Dazu gehören insbesondere das „BeOmax“-System [131–135] und das Personendosimetriesystem „BeOSL“ [136–139], welche mit Unterstützung der Auswertestelle für Strahlendosimeter am Helmholtz Zentrum München entwickelt werden. Die Dosimeter besitzen 2 oder 4 Elemente und sind zur Messung der Personendosisgrößen $H_p(10)$ und $H_p(0,07)$ oder der Ortsdosisgrößen $H^*(10)$ und $H'(0,07)$ geeignet. Beide Varianten sind in Abbildung 50 dargestellt. Die Elemente sind dabei von lichtdichtem, schwarzem ABS-Kunststoff umgeben.

Die durch ein Element gemessene Dosis ist insbesondere von der Energie des Strahlungsfeldes abhängig. So verändert sich das Messsignal bei Variation der Photonenenergie trotz gleicher Äquivalentdosis aufgrund der Energie- und Materialabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts. Für den operativen Einsatz müssen die Schwankungen der aus den Messsignalen berechneten Dosiswerte jedoch für verschiedene Energien unterhalb gesetzlich festgelegter Grenzen bleiben [140, 141].

Daher werden mehrere Elemente mit unterschiedlichen Filtern zur Bestimmung der Orts- oder Personendosis verwendet. Dies ist anhand eines 3-Elementdosimeters in Abbildung 51 dargestellt. Jeder Filter sorgt für eine Veränderung der Energieabhängigkeit des Messeffekts des dahinterliegenden Elements. Durch eine geschickte Wahl der Filtermaterialien und -dicken und einer optimalen Linearkombination der drei Messwerte lässt sich die Energieabhängigkeit des Messsignals minimieren. Die Aufgabe besteht darin, diese Filterkombination zu finden.



Abbildung 50: BeOSL 2- (oben) und 4-Elementdosimeter (unten) [136]

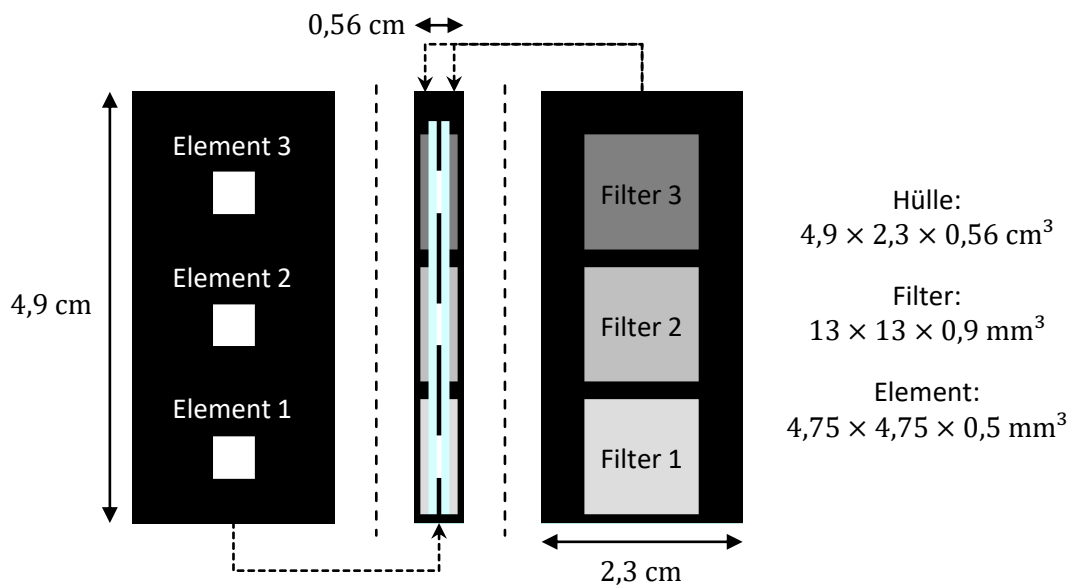


Abbildung 51: Querschnitt (mittig) und Längsschnitt durch die Detektorelemente (links) bzw. durch die drei Filterpaare (rechts) eines 3-Elementdosimeters (weiß: BeO, schwarz: ABS, hellblau: Luft)

Eine Möglichkeit ist die Herstellung von Dosimetern mit unterschiedlicher Kombination verschiedener Materialien und Dicken. Jedes muss anschließend zur Kalibrierung mit Photonen unterschiedlicher Energien im Bereich 30 keV bis 1,25 MeV unter verschiedenen Winkeln bestrahlt und ausgewertet werden. Das Personendosimeter wird dazu mittig auf die größte Oberfläche eines quaderförmigen Wasserphantoms platziert. Dieses besitzt ein Volumen von $30 \times 30 \times 15 \text{ cm}^3$ und ist in Abbildung 52 dargestellt. Das Phantom repräsentiert den Oberkörper des Trägers. Die Bestrahlung erfolgt mit den Radionukliden Cäsium-137 (^{137}Cs) und Cobalt-60 (^{60}Co) und mit Röntgenstrahlung der N-Serie im schmalen Energiebereich [142] im großen Abstand zur Quelle, sodass das auftreffende Strahlungsfeld als parallel und homogen charakterisiert werden kann. Diese Prozedur bedeutet jedoch einen hohen finanziellen Aufwand sowohl für die Herstellung als auch für die notwendige Arbeitszeit. Außerdem ist die Bereitstellung aller geforderten Strahlenqualitäten sehr aufwändig und kostenintensiv.

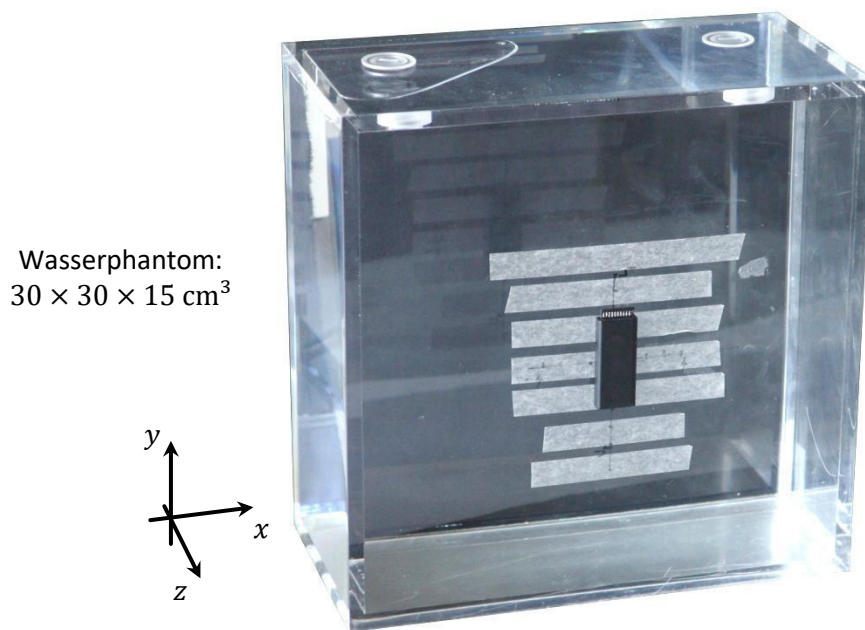


Abbildung 52: Personendosimeter auf Wasserphantom

Eine kostengünstige Alternative bietet die Monte Carlo Simulation dieser Messaufgabe. Ist die Bestrahlungsgeometrie erstellt, können Filtermaterialien beliebig variiert werden. Mit Hilfe von Rechenclustern ist es dann möglich, mehrere Kombinationen gleichzeitig zu simulieren. Um schnell zu einem Ergebnis zu kommen, ist eine möglichst geringe Rechenzeit wünschenswert.

Aus diesem Grund wird im Folgenden der Einsatz effizienzsteigernder Methoden geprüft. Beispielhaft wird dazu die Filterkombination Luft-Teflon-Blei bei Bestrahlung direkt von vorn betrachtet. Neben ^{137}Cs und ^{60}Co werden auch die Röntgenspektren N100, N60 und N15 simuliert.

Die Simulationsgeometrie ist in Abbildung 53 dargestellt, das Dosimeter detailliert in Abbildung 51. Das PMMA-Gehäuse des Wasserphantoms wird vereinfacht als aus Wasser bestehend simuliert, da der makroskopische Wirkungsquerschnitt beider Materialien im betrachteten Energiebereich einen ähnlichen Verlauf besitzt [123].

Als Quelle kommt ein homogenes, paralleles Strahlungsfeld zum Einsatz und geschätzt wird die spektrale Energiedepositionsverteilung in den einzelnen BeO-Chips. Aus diesem kann anschließend durch Integration die Dosis gewonnen werden. Die Berechnung des Spektrums ist zwar aufwendiger, enthält jedoch mehr physikalische Informationen. Auf die Berechnung der optimalen Linearkombination der Messsignale der drei Elemente und eine Variation der Filtermaterialien wird im Rahmen dieser Arbeit verzichtet.

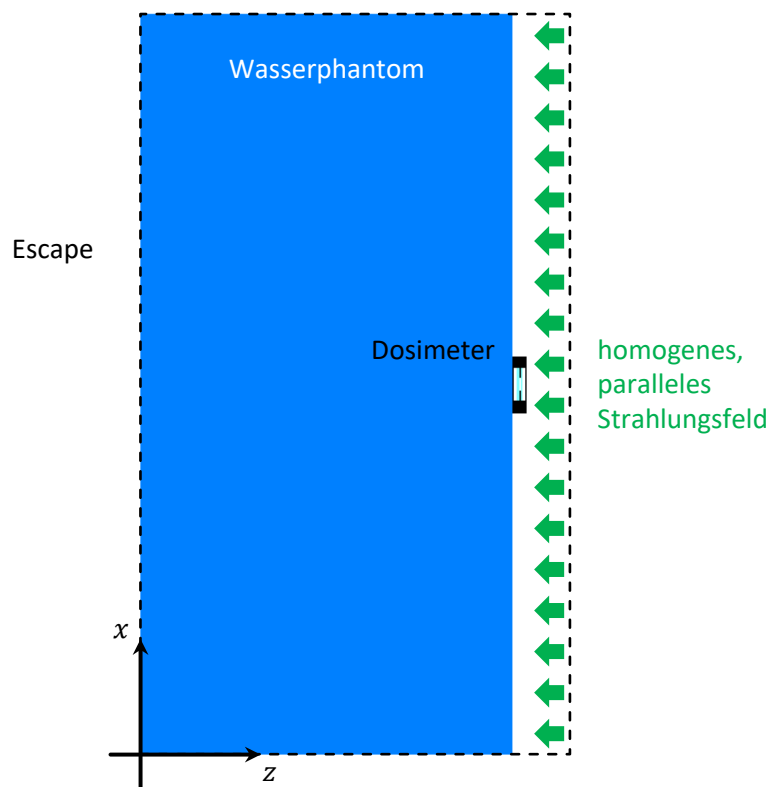


Abbildung 53: Geometrie der Dosimeterbestrahlung in der Monte Carlo Simulation

Die Wechselwirkungsprozesse in Luft können aufgrund des um etwa drei Größenordnungen kleineren Wirkungsquerschnitts gegenüber denen im Dosimeter oder im Phantom vernachlässigt werden [123]. Daher wird im Bereich vor dem Phantom anstatt eines Materials Vakuum simuliert. Dies gilt jedoch nicht für die Lufteinschlüsse im Dosimeter. Hier ist eine möglichst genaue Berechnung der Effekte wünschenswert.

Die maximal mögliche Energie durch Photonen erzeugter Elektronen entspricht der Quellenergie von 661,7 keV bzw. 1332,5 keV. Sie entstehen durch Photoeffekt und werden hauptsächlich in Vorwärtsrichtung emittiert [8]. Ein detaillierter Elektronentransport im Wasserphantom folglich vernachlässigt werden, was Vergleichsrechnungen bestätigen.

4.2.2 Analoge Monte Carlo Methoden

Zunächst erfolgt die analoge Simulation der Aufgabenstellung mit der maximal möglichen Anzahl von $4,3 \cdot 10^9$ Quellteilchen in AMOS von. Im Folgenden werden die Energiedepositionsspektren in den drei BeO-Detektoren analysiert. Die Ergebnisse sind auf die Fluenz Φ der Quellteilchen aus ^{137}Cs , ^{60}Co , N100, N60 und N15 normiert.

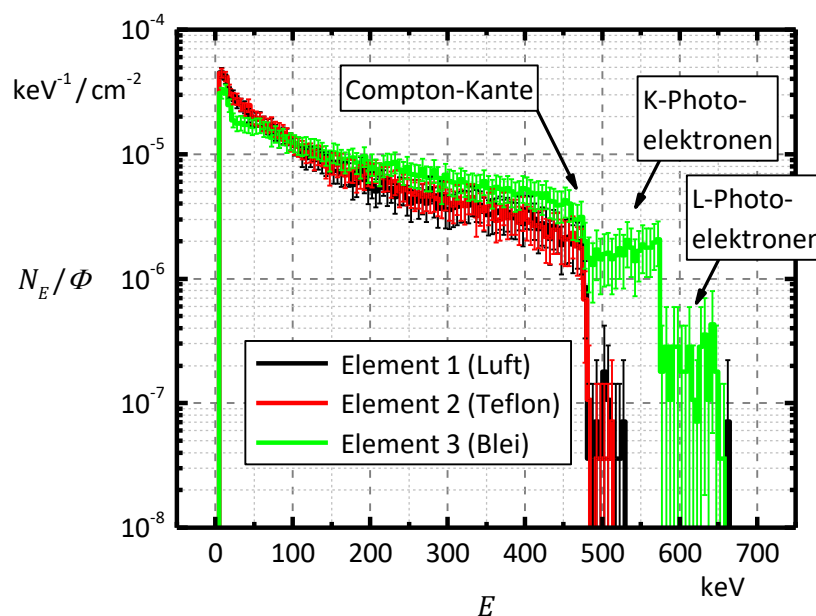


Abbildung 54: Spektrale Verteilung $N_E(E)$ der Energiedepositionen bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ (^{137}Cs) für die drei Dosimeterelemente mit Luft-, Teflon- bzw. Bleifilter (99,73% Vertrauensbereich)

In den Energiedepositionsspektren der ^{137}Cs -Bestrahlung aus Abbildung 54 ist deutlich die COMPTON-Kante bei $E = 477,3$ keV zu erkennen. Diese liegt bei der Maximalenergie im Phantom und im Dosimeter rückgestreuter Photonen. In den Elementen 1 und 2 gibt es bei höheren Energien keine signifikanten Beiträge mehr. Im Element 3, welches einen Bleifilter besitzt, gibt es jedoch noch Beiträge von Photoelektronen. Diese werden in Blei durch Photoeffekt aus der Elektronenhülle ausgelöst und besitzen eine Maximalenergie von $E = 573,6$ keV, aus der K-Schale, und $E = 645,7$ keV, aus der L-Schale. Da die Photoeffektwahrscheinlichkeit mit zunehmender Energie sprunghaft abnimmt [6], bilden sich deutliche Kanten in der Verteilung aus. Photoelektronen aus höheren Schalen sind zu selten und liefern keine Beiträge. Ein Vollenergiepeak ist in allen drei Spektren nicht vorhanden, da das Vollenergieansprechvermögen für Photonen der Energie 661,7 keV des nur 0,5 mm dicken BeO-Chips praktisch null ist.

Das Kontinuum hat in allen Spektren die gleiche Form. Beiträge liefern Sekundärteilchen aus Wechselwirkungsprozessen von Photonen im Dosimeter. Dazu gehören Quellphotonen und aus dem Phantom rückgestreute Photonen. Letzte verursachen nur einen kleinen Anteil bis etwa 150 keV, was in Abbildung 55 anhand des Spektrums einer Vergleichssimulation ohne Wasserphantom gezeigt ist. Der Bleifilter sorgt aufgrund des größeren Wirkungsquerschnitts, Abbildung 56, für eine stärkere Verringerung, als Luft oder Teflon. Gleichzeitig ist die Wahrscheinlichkeit für Photoeffekt im Bleifilter wegen der höheren Ordnungszahl viel größer als in Teflon oder Luft [8], wodurch das Spektrum von Element 3 oberhalb von 150 keV aufgrund der erzeugten Photoelektronen erhöht ist, Abbildung 54. Diese erreichen hauptsächlich das nahe liegende Element 3 und liefern praktisch keine Beiträge in den anderen Elementen.

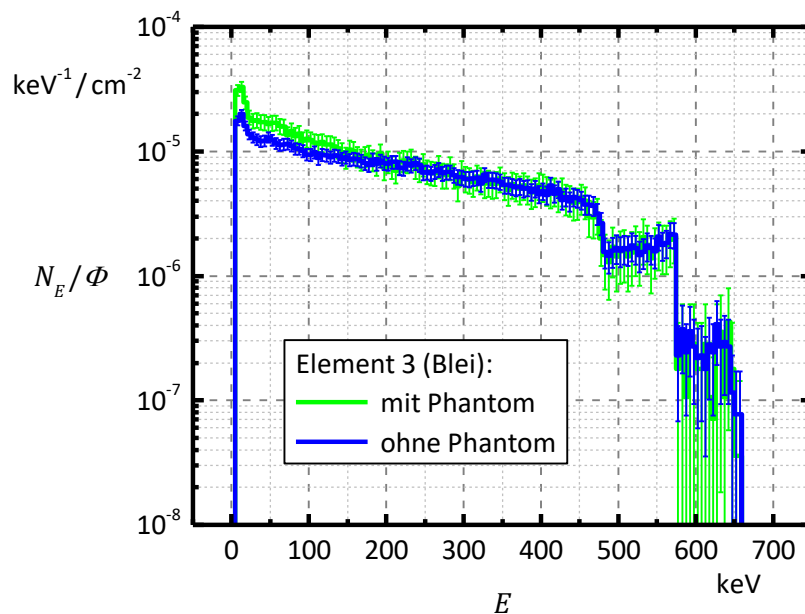


Abbildung 55: Spektrale Verteilung $N_E(E)$ der Energiedepositionen bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ (^{137}Cs) für das Dosimerelement mit Bleifilter, mit und ohne Wasserphantom (99,73% Vertrauensbereich)

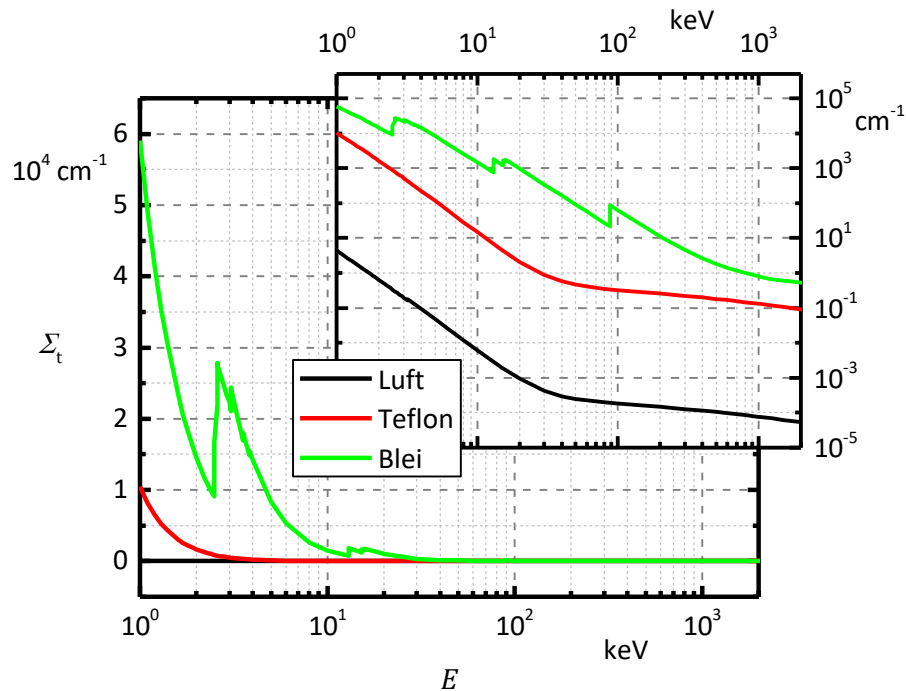


Abbildung 56: Totaler Makroskopischer Wirkungsquerschnitt Σ_t von Photonen in Luft, Teflon und Blei in halblogarithmischer und logarithmischer Darstellung [123]

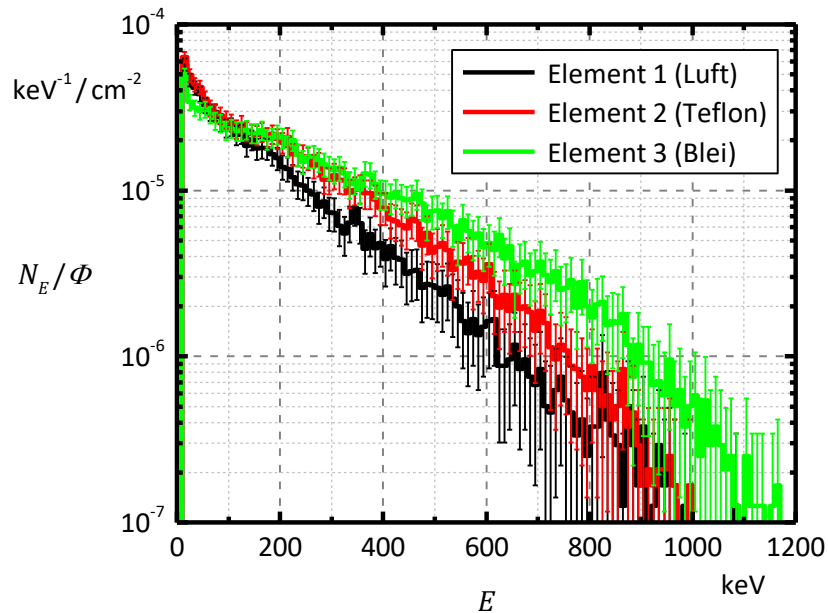


Abbildung 57: Spektrale Verteilung $N_E(E)$ der Energiedepositionen bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ (^{60}Co) für die drei Dosimiterelemente mit Luft-, Teflon- bzw. Bleifilter (99,73% Vertrauensbereich)

Kanten oder Peaks sind in den Energiedepositionsspektren der ^{60}Co -Bestrahlung (1173,2 keV und 1332,5 keV zu gleichen Anteilen) nicht zu erkennen, Abbildung 57. Das Vollenergieansprechvermögen ist auch hier praktisch null. Die COMPTON-Kanten beider Quellenergien liegen bei $E = 963,4$ keV

bzw. 1118,1 keV. In diesem Bereich ist die Standardunsicherheit jedoch zu groß, um diese zu identifizieren. Weiterhin liegen die Spektren der Elemente 1 und 2 im Gegensatz zur ^{137}Cs -Bestrahlung nicht mehr aufeinander. Die Ursache ist die größere Energie der in Blei erzeugten Photoelektronen. Diese haben dadurch eine größere Reichweite und liefern signifikante Beiträge im Element 2.

Neben ^{60}Co und ^{137}Cs als Nuklidquellen werden Personendosimeter auch mittels Röntgenstrahlung kalibriert. Dabei kommen genormte Spektren zum Einsatz, deren Energieverteilung genau vermessen und tabelliert ist. Dazu gehören insbesondere die Emissionsspektren der Röntgen-N-Serie, welche durch U. ANKERHOLD an der PTB in Braunschweig aufgenommen wurden [143]. Die dazugehörigen Dichtefunktionen sind in Abbildung 58 dargestellt.

Die zur Erzeugung der Spektren verwendeten Röntgenröhren mit Beschleunigungsspannungen 15 kV, 60 kV und 100 kV besitzen eine Wolfram-Anode und einen 1,0 mm dicken Beryllium-Vorfilter. Weiterhin werden 0,5 mm Aluminium für das N15-Spektrum, 4 mm Aluminium sowie 0,6 mm Kupfer für das N60-Spektrum und 4 mm Aluminium sowie 5 mm Kupfer für das N100-Spektrum verwendet [142]. Die charakteristische Röntgenstrahlung aus Wolfram ist anhand der Peaks bei etwa 8 keV, 10 keV, 11 keV, 60 keV und 70 keV erkennbar. Die Peaks im Bereich 6 keV bis 8 keV stellen Escape-Peaks im HPGe-Detektor dar, welcher zur Messung der Spektren von U. ANKERHOLD verwendet wurde [143].

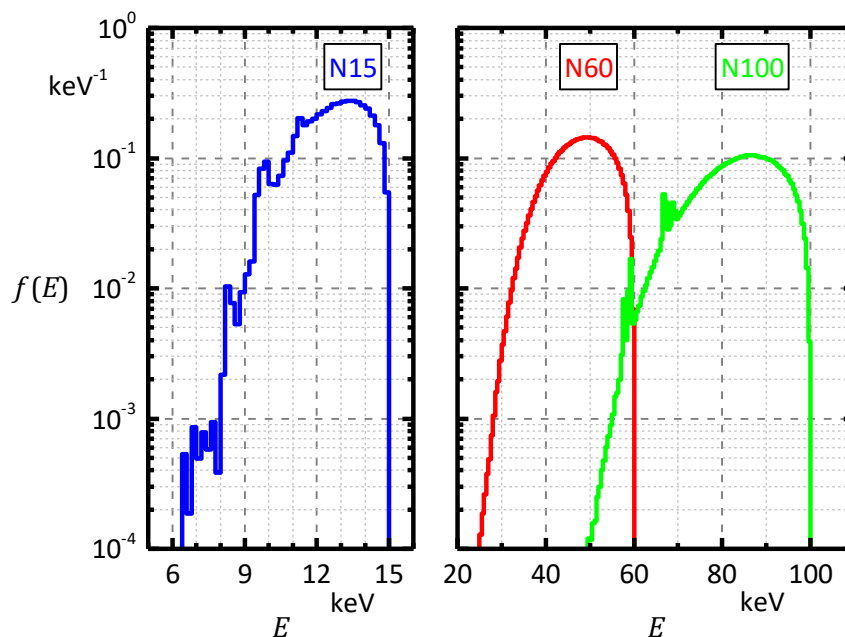


Abbildung 58: In der Simulation verwendete Dichtefunktionen der N-Serien-Emissionsspektren [143]

Für alle drei Röntgenspektren wird die spektrale Verteilung der Energiedepositionen der drei Dosimeteerelemente zunächst mit analoger Monte Carlo Methode innerhalb einer Simulation geschätzt. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 59 bis 61, normiert auf die Fluenz der Quellteilchen, dargestellt. Die Anzahl an Quellteilchen beträgt jeweils $4,3 \cdot 10^9$, was der maximal möglichen Anzahl entspricht.

Alle Spektren sind Überlagerungen aus Energiedepositionen der Quellphotonen und sowohl im Dosimeter als auch im Phantom gestreuter Photonen bzw. erzeugter Elektronen. Je kleiner die Maximalenergie, desto geringer ist der Rückstreuanteil aus dem Phantom und desto weniger tragen außerhalb der BeO-Chips entstehende Elektronen zum Spektrum bei. Insbesondere im N15-Spektrum des ersten Elements, ungefiltert (Luft), ist die Quellphotonenverteilung wiedererkennbar. Zusätzlich können in den Bleispektren die L_{α} -, L_{β} - und M_{α} -Linien der charakteristischen Röntgenstrahlung aus Blei bei etwa 10 keV, 12 keV und 13 keV identifiziert werden.

Außer bei N15-Bestrahlung sind die Spektrenverläufe von Element 1 und 2 identisch. Erst bei niedrigen Energien unterscheiden sich die Wirkungsquerschnittsdichten der Filtermaterialien Luft und Teflon signifikant [123] und es kommt zu einer Verschiebung. Der Bleifilter sorgt aufgrund der viel größeren Ordnungszahl für eine größere Schwächung der Primärstrahlung [6]. Durch die größere Photoeffektwahrscheinlichkeit entsteht eine größere Anzahl an Photoelektronen, was die Spektren des dritten Elements stärker verschmiert.

Bei N15-Bestrahlung sind aufgrund der großen Standardabweichungen kaum Strukturen erkennbar, da die Transmission von Photonen durch den Bleifilter unterhalb von 15 keV theoretisch weniger als 10^{-50} beträgt [123]. Das dargestellte Spektrum resultiert folglich nur aus seitlich eingestreuten Photonen und Elektronen.

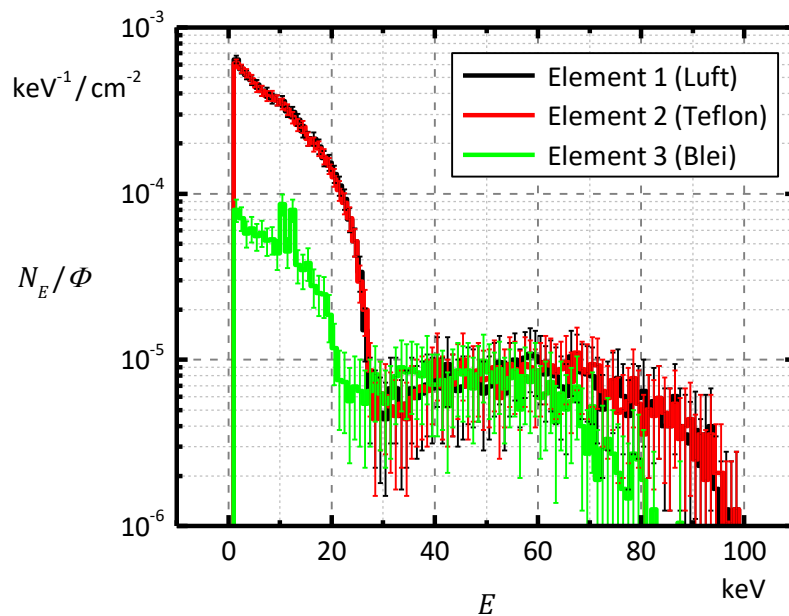


Abbildung 59: Spektrale Verteilung $N_E(E)$ der Energiedepositionen bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ (N100) für die drei Dosimeterelemente mit Luft-, Teflon- bzw. Bleifilter (99,73% Vertrauensbereich)

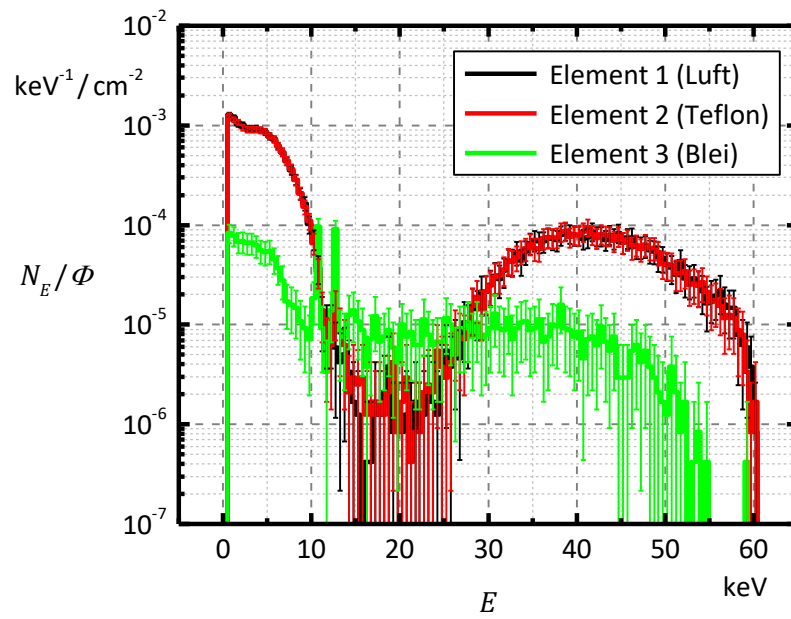


Abbildung 60: Spektrale Verteilung $N_E(E)$ der Energiedepositionen bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ (N60) für die drei Dosimeterelemente mit Luft-, Teflon- bzw. Bleifilter (99,73% Vertrauensbereich)

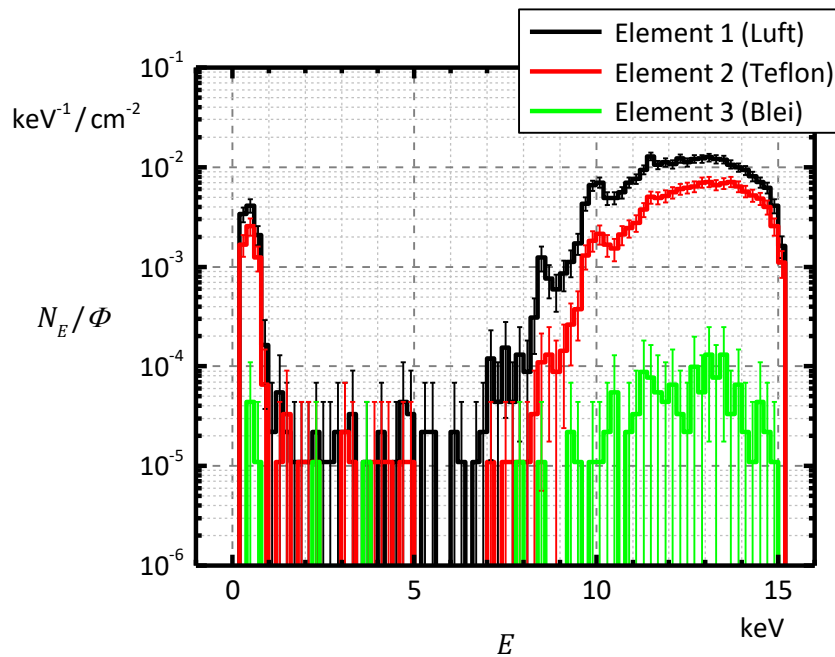


Abbildung 61: Spektrale Verteilung $N_E(E)$ der Energiedepositionen bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ (N15) für die drei Dosimeterelemente mit Luft-, Teflon- bzw. Bleifilter (99,73% Vertrauensbereich)

Aus den spektrale Verteilungen $N_E(E)$ der Energiedepositionen kann durch Integration die Dosis D^i/Φ bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ der drei Elemente i berechnet werden. Da in die Effizienz einer Simulation, gemessen durch die FOM, nur eine einzelne Messgröße mit der zugehörigen Standardunsicherheit eingehen kann, wird hier die relative Messabweichung des Elements mit der geringsten Genauigkeit verwendet. Für die FOM folgt

$$FOM = \frac{1}{R^2 \cdot t},$$

$$R = \max \left\{ \frac{\Delta D^1/\Phi}{D^1/\Phi}; \frac{\Delta D^2/\Phi}{D^2/\Phi}; \frac{\Delta D^3/\Phi}{D^3/\Phi} \right\}. \quad (88)$$

Aufgrund der Simulationszeit im Bereich von 20 Stunden für eine Quellteilchenanzahl N von $4,3 \cdot 10^9$ wird jede Simulation nur ein Mal durchgeführt. Anschließend wird mit Hilfe der $1/\sqrt{N}$ -Abhängigkeit der Standardunsicherheit berechnet, wie groß die optimale Quellteilchenanzahl für eine Messabweichung von $R = 3\%$ sein müsste. Mit Hilfe der Effizienz bezüglich $4,3 \cdot 10^9$ Quellteilchen kann schließlich auch die dafür notwendige Simulationszeit abgeschätzt werden. Diese Ergebnisse sind in Tabelle 2 aufgelistet. Die Standardunsicherheit der Rechenzeit beträgt 5% (99,73% Vertrauensbereich). Dieser Wert folgt aus der großen Anzahl an Simulationen für die tiefe Durchdringung, wobei sich eine mittlere Standardunsicherheit der Rechenzeit von $(4,3 \pm 0,7)\%$ für Einzelmessungen ergibt.

Tabelle 2: Dosis D^i/Φ der drei Elemente i bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ , optimale Quellteilchenanzahl N , Simulationszeit t und Effizienz FOM der analogen Simulation (99,73% Vertrauensbereich)

	N	D^1/Φ in fGy/cm ⁻²	D^2/Φ in fGy/cm ⁻²	D^3/Φ in fGy/cm ⁻²	t in h	FOM in h ⁻¹
⁶⁰ Co	$5,0 \cdot 10^8$	6130 ± 180	9360 ± 240	12700 ± 300	$2,1 \pm 0,1$	519 ± 26
¹³⁷ Cs	$4,0 \cdot 10^8$	2490 ± 70	2600 ± 80	3880 ± 100	$2,0 \pm 0,1$	564 ± 28
N100	$1,5 \cdot 10^9$	443 ± 6	437 ± 6	125 ± 4	$25,9 \pm 1,3$	$42,9 \pm 2,1$
N60	$2,3 \cdot 10^9$	432 ± 5	430 ± 5	56 ± 2	$57,6 \pm 2,9$	$19,3 \pm 1,0$
N15	$3,9 \cdot 10^9$	2911 ± 6	1487 ± 5	$15,1 \pm 0,5$	$85,3 \pm 0,4$	$13,0 \pm 0,7$

Um die Zielgenauigkeit von 3% (99,73% Vertrauensbereich) zu erreichen, werden für N15-Bestrahlung mit $N = 3,9 \cdot 10^9$ nahezu genauso viele Quellteilchen benötigt, wie innerhalb einer Simulation maximal zur Verfügung stehen. Die Simulation dauert somit etwa dreieinhalb Tage. Die Rechenzeit der N60-Bestrahlung beträgt zweieinhalb Tage und die der N100-Bestrahlung mehr als einen vollen

Tag. Im Gegensatz dazu ist die Simulationszeit für ^{60}Co - und ^{137}Cs -Bestrahlung mit etwa zwei Stunden gering. Folglich sind für die Simulationen der Röntgenbestrahlungen effizienzsteigernde Methoden unabdingbar.

4.2.3 Effizienzsteigernde Methoden

Das Ziel der Effizienzsteigerung für diese Problemstellung ist die Entwicklung eines Verfahrens, welches für alle Dosimetervariationen verwendet werden kann. Die Methoden sollen möglichst unabhängig von den Filtermaterialien und von der Anzahl an Elementen eine Verkürzung der Rechenzeit erzielen. Dadurch können sie in einer Vielzahl an Simulationen zur Bestimmung des optimalen Dosimeterdesigns eingesetzt werden.

Aus diesen Anforderungen folgt, dass die zur Vorbereitung verschiedener Ansätze benötigte Zeit eine untergeordnete Rolle spielt. Im Fall der Gewichtsfenstertechnik bedeutet dies, dass die Effizienz für die Berechnung optimaler Grenzen mit Hilfe des Generators von geringerer Bedeutung ist. Aus diesem Grund steht letztendlich die Effizienz derjenigen Simulation im Fokus, welche alle wirksamen effizienzsteigernden Maßnahmen verwendet.

Quell- und Geometrie Anpassungen

In einem ersten Schritt wird die Bestrahlung in zwei separate Monte Carlo Berechnungen aufgeteilt. Der Vergleich zwischen den Simulationen mit und ohne Wassersphantom (beispielsweise für ^{137}Cs in Abbildung 55) zeigt, dass nur ein kleiner, vernachlässigbarer Teil der Beiträge von Photonen stammt, welche aus dem Phantom rückgestreut werden. Da die gesamte Vorderseite des Phantoms mit einem parallelen und homogenen Photonenfeld bestrahlt wird, trifft nur ein geringer Anteil der simulierten Quellteilchen direkt auf das Dosimeter. In einer separaten Simulation wird nur das Dosimeter ohne ein dahinter liegendes Phantom bestrahlt. Bei der Simulation mit Phantom wird die Flächenquelle vom Rand der Geometrie auf die Oberfläche des Phantoms gelegt. Dieses Vorgehen ist in Abbildung 62 veranschaulicht.

Bei dieser Aufteilung bleibt die Schwächung der Photonenstrahlung im Dosimeter in Simulation 1 unberücksichtigt. In Simulation 2 wird der Beitrag von Photonen, welche im Dosimeter wechselwirken, anschließend in das Phantom eindringen, von dort wieder in das Dosimeter zurück gestreut werden und letztendlich erneut Energie im Dosimeter deponieren, vernachlässigt. Dass diese Fehler nicht signifikant sind, zeigen Testrechnungen. Das Ergebnis ist eine nicht signifikante und daher akzeptable Abweichung der Dosis von höchstens $(3,2 \pm 4,4)\%$ (99,73% Vertrauensbereich) für das Element 3 mit Bleifilter bei N60-Bestrahlung. Bei den anderen Elementen und allen anderen Strahlenqualitäten ist der Unterschied geringer und ebenfalls nicht signifikant. Dies gilt jedoch nicht für N15-Bestrahlung, da die Schwächung der Photonenstrahlung im Dosimeter aufgrund der geringen Energie zu groß ist. Der Unterschied beträgt $(21,5 \pm 5,2)\%$.

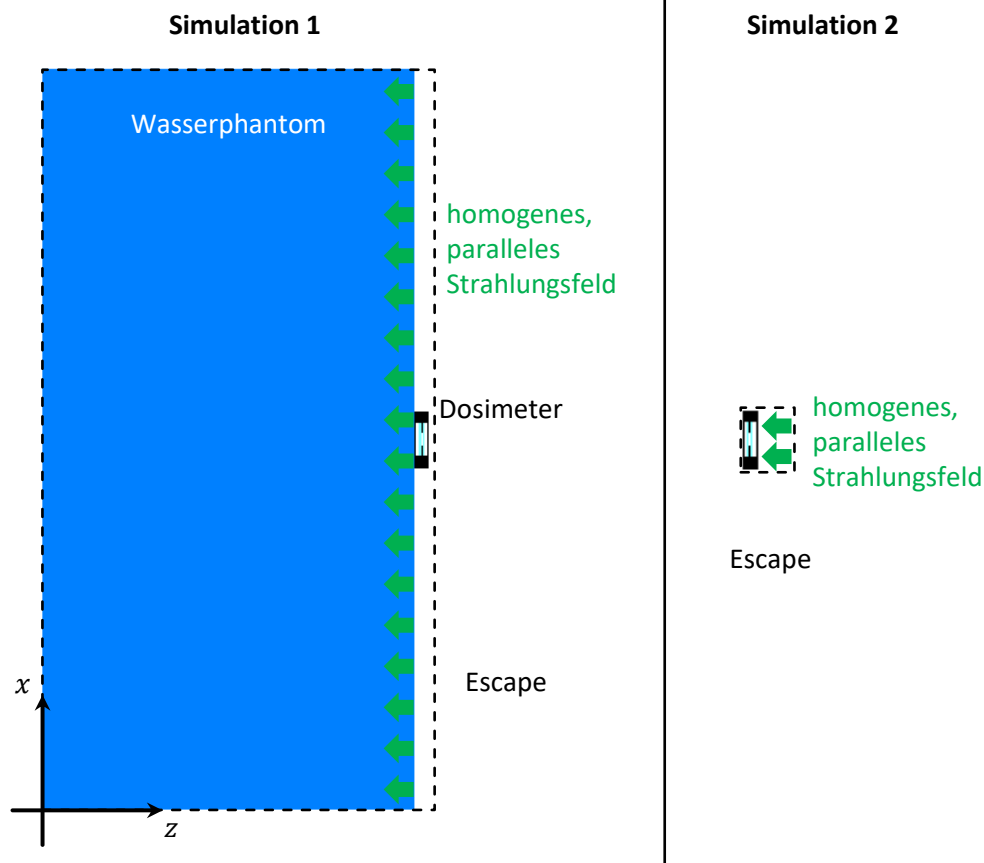


Abbildung 62: Geometrien der separierten Simulationen: Simulation 1: nur Bestrahlung des Phantoms, Simulation 2: nur Bestrahlung des Dosimeters ohne Phantom

Der Vorteil der Aufteilung ist, neben der Rechenzeiteinsparung durch Parallelisierung, die Möglichkeit zur Optimierung der Anzahl an Quellteilchen hinsichtlich der Standardunsicherheit des Ergebnisses. Die Dosiswerte aus Simulation 1 stellen einen geringeren Anteil am Gesamtergebnis dar. Folglich kann die relative Messabweichung hier größer sein, als bei Simulation 2. Mit der Forderung, dass die Standardunsicherheit der Gesamtdosis der einzelnen Elemente höchstens 3% (99,73% Vertrauensbereich) betragen soll, ergibt sich eine optimale Anzahl N an zu simulierenden Quellteilchen für beide Simulationsteile. Diese wird jeweils mit Hilfe der $1/\sqrt{N}$ -Abhängigkeit der Standardunsicherheit der geschätzten Dosis ermittelt.

Aufgrund der geringen Maximalenergie von 15 keV werden für die N15-Bestrahlung weitergehende Veränderungen der Geometrie überprüft. Die mittlere freie Weglänge in Wasser beträgt hier bei der wahrscheinlichsten Energie von 13 keV etwa 0,4 cm [123]. Folglich ist die Rückstreuung aus großen Teilen des $30 \times 30 \times 15 \text{ cm}^3$ messenden Wasserphantoms vernachlässigbar. Dadurch können sowohl die Quelle als auch das Phantom verkleinert werden, Abbildung 63. Zusätzlich besteht die Möglichkeit, auf die Berechnung der Dosis des dritten Elements mit Bleifilter zu verzichten, da dessen Wert nur ca. 0,4% der Gesamtdosis ausmacht (Tabelle 2).

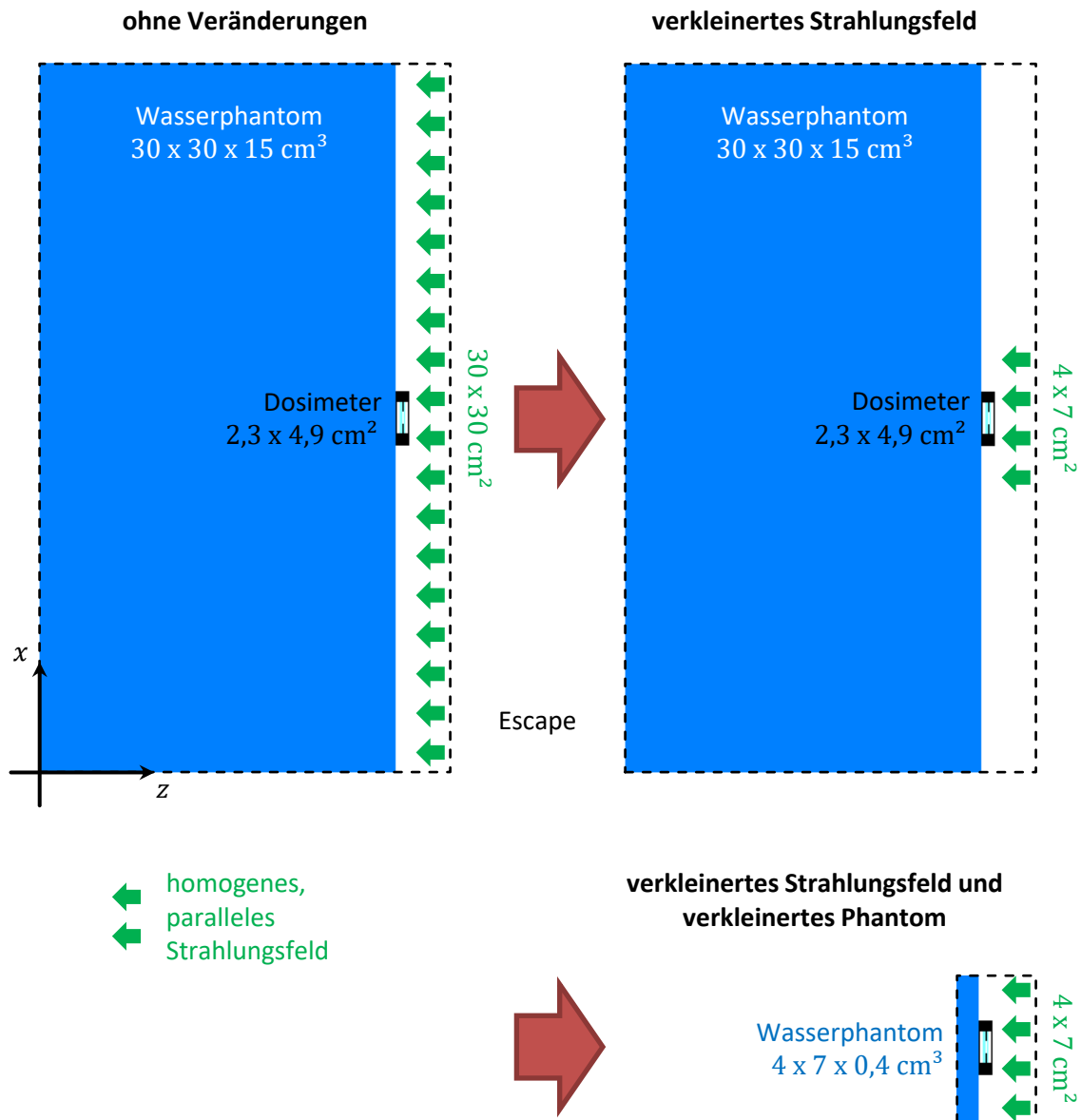


Abbildung 63: Veränderte Geometrie bei N15-Bestrahlung: verkleinertes Strahlungsfeld (oben) und zusätzlich verkleinertes Wasserphantom (unten)

In Abbildung 63 ist weiterhin dargestellt, wie die Quellgeometrie bei N15-Bestrahlung verändert wird. Das Strahlungsfeld wird auf eine Fläche verkleinert, die sich bis auf einen ca. 1 cm breiten Bereich um das Dosimeter herum erstreckt. Die Beschränkung des Wasserphantoms auf diesen Bereich ist in den Abbildungen 63 veranschaulicht. Dessen Tiefe umfasst dann nur noch eine mittlere freie Weglänge von Quellphotonen der wahrscheinlichsten Energie in Wasser.

Gewichtsfenstertechnik

Für alle Bestrahlungsarten außer N15 gilt, dass die mittlere freie Weglänge der Quellphotonen in den unterschiedlichen Dosimetermaterialien viel größer ist, als die Ausdehnung des Dosimeters selbst. Daher ist eine Anwendung der Fenstertechnik in den einzelnen Strukturen des Dosimeters nicht sinnvoll. Der Wert für die mittlere freie Weglänge liegt für Photonen aus diesen Quellen in ABS bei mehreren Zentimetern. Bei der Aufteilung in zwei Simulationen wird die Simulation 2, Bestrahlung des Dosimeters ohne Phantom, daher nicht weiter verändert.

In Simulation 1, Bestrahlung des Phantoms, hingegen kann das Wasserphantom in regelmäßige Raumbereiche aufgeteilt werden. Die Aufteilung soll möglichst einfach sein und unter Berücksichtigung des Speicherbedarfs höchstens im Bereich von 100 Elementen liegen. Daher wird der Quader in ein Voxelphantom mit $6 \times 6 \times 3 = 108$ Würfeln mit einer Kantenlänge von 5 cm unterteilt. Dies ist in Abbildung 64 veranschaulicht.

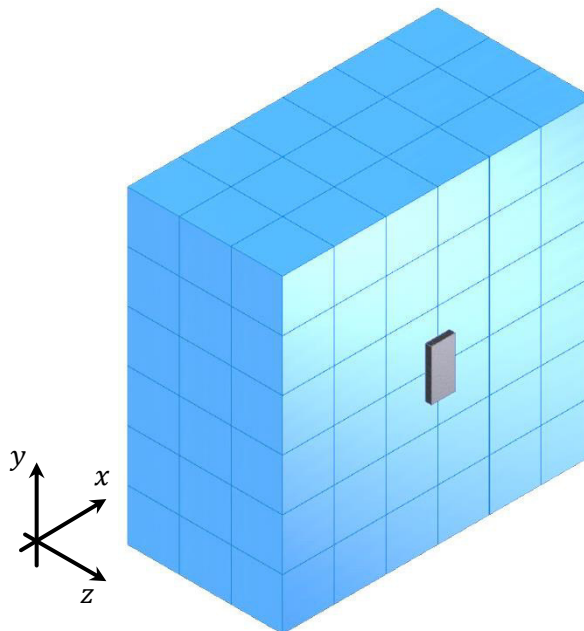


Abbildung 64: Dosimeter auf Wasserphantom, unterteilt in 108 Voxel

Aufgrund der geringen Schwächung der primären Photonenstrahlung im Dosimeter bietet sich bei der Berechnung der Gewichtsfenster an, das gesamte Dosimeter als Detektor zu betrachten. Dadurch werden Photonen bevorzugt, die irgendwo innerhalb des Dosimeters Energie deponieren. Somit ist die innere Struktur des Dosimeters weniger von Bedeutung, wodurch sich die Fenstergrenzen im Phantom auch auf andere Dosimeterdesigns oder Filtermaterialien anwenden lassen. Des Weiteren benötigt die Gewichtsfensterberechnung auf diese Weise weniger Zeit.

Für die Anwendung von Gewichtsfenstergenerator und -technik bei N15-Bestrahlung soll auch das verkleinerte Phantom in Raumbereiche unterteilt werden. Die Aufteilung soll auch hier möglichst einfach sein und unter Berücksichtigung des Speicherbedarfs höchstens im Bereich von 100 Elementen liegen. Folglich wird es in $8 \times 14 = 112$ Voxel mit Volumen $0,5 \times 0,5 \times 0,4 \text{ cm}^3$ gegliedert, Abbildung 65. Diese Unterteilung wird in beiden veränderten Geometrien aus Abbildung 63 vorgenommen. Im Falle des verkleinerten Strahlungsfeldes mit unverändertem Wasserphantom bildet der Rest des Phantoms, grauer Escape-Bereich in Abbildungen 65, einen weiteren Raumbereich für ein zusätzliches Gewichtsfenster.

Weiterhin stellen auch alle Teile des Dosimeters, bis auf die BeO-Chips, Raumbereiche für die Berechnung von Fenstergrenzen dar. Da der Generator nur Beiträge zu einem einzigen Detektor bewerten kann, werden die drei Elemente innerhalb der Generatorsimulation zunächst als ein gemeinsamer Detektor gezählt.

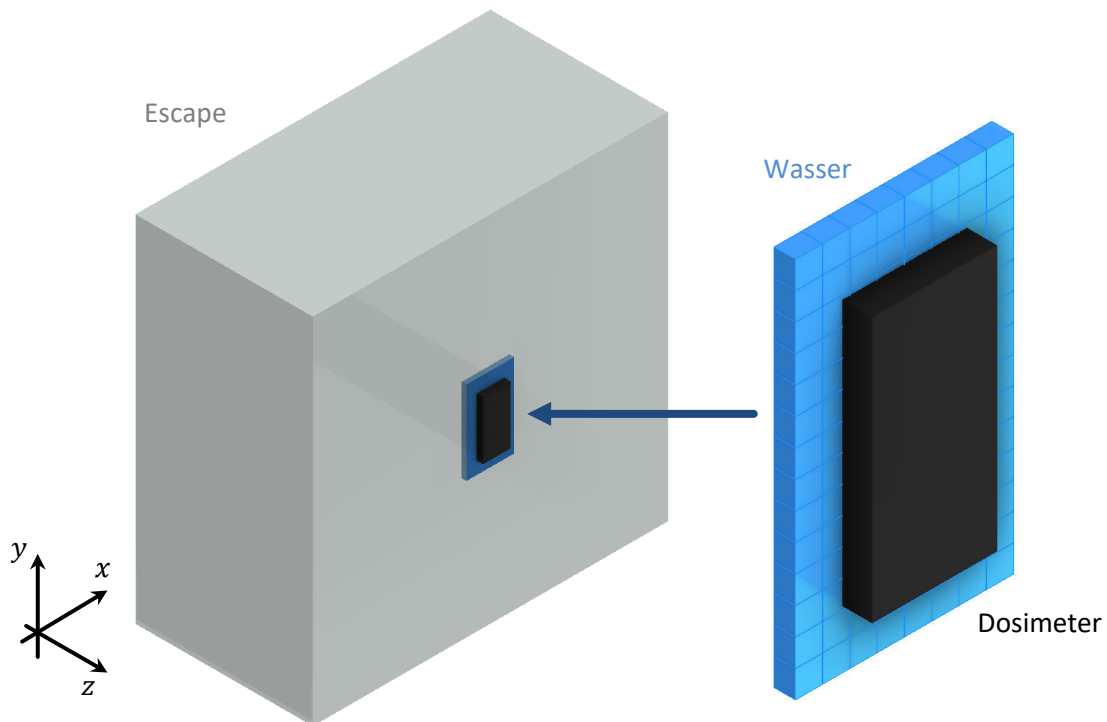


Abbildung 65: Dosimeter auf verkleinertem Wasserphantom, unterteilt in 112 Voxel

4.2.4 Ergebnisse

Allgemein

In Tabelle 3 sind alle im Rahmen dieser Arbeit verwendeten effizienzsteigernden Methoden für die jeweiligen Strahlenqualitäten zusammengefasst. Insgesamt wurden 56 Simulationen durchgeführt und ausgewertet. Eine detaillierte Darstellung aller Ergebnisse befindet sich im Anhang H. Aufgrund der großen Simulationszeiten wird jede Simulation mit der jeweiligen effizienzsteigernden Methode nur ein Mal durchgeführt. Anschließend wird auch hier mit Hilfe der $1/\sqrt{N}$ -Abhängigkeit der Standardunsicherheit von der Quellteilchenzahl N berechnet, wie groß die optimale Anzahl für eine Messabweichung von $R = 3\%$ sein müsste. Daraus ergeben sich dann die Simulationszeit und die Effizienz, gemessen durch die FOM. Die Standardunsicherheit der Rechenzeit beträgt 5% (99,73% Vertrauensbereich), was aus den Rechenzeitmessungen der durchgeführten Simulationen für die tiefe Durchdringung folgt.

Tabelle 3: Übersicht über die verwendeten effizienzsteigernden Methoden für die jeweiligen Strahlenqualitäten

Methoden	Strahlenqualitäten
Aufteilung in zwei Simulationen: 1. Bestrahlung des Phantoms 2. Bestrahlung des Dosimeters ohne Phantom	^{60}Co , ^{137}Cs , N100, N60
Verkleinerung des Strahlungsfelds	N15
Verkleinerung des Wasserphantoms	N15
energieunabhängige und -abhängige Gewichtsfensterstechnik	^{60}Co , ^{137}Cs , N100, N60, N15

Die erzielten Effizienzgewinne für die Bestrahlung eines Personendosimeters sind in der folgenden Tabelle 4 zusammengefasst. Hierbei werden für jedes Bestrahlungsszenarium nur die Methoden betrachtet, für welche die größte Effizienzsteigerung gegenüber analog resultiert.

Tabelle 4: Methoden mit dem größten Effizienzgewinn für die betrachteten Bestrahlungsquellen (t_0 – Simulationszeit der analogen Simulation ohne Veränderungen, t_M – Simulationszeit mit effizienzsteigernden Methoden, 99,73% Vertrauensbereich)

Strahlungsquelle	t_0	Methoden	t_M	Effizienzsteigerung
^{60}Co	$(128 \pm 7) \text{ min}$	Aufteilung in zwei analoge Simulationen	$(119 \pm 6) \text{ min}$	$\times (1,2 \pm 0,1)$
^{137}Cs	$(119 \pm 6) \text{ min}$	Aufteilung in zwei analoge Simulationen	$(95 \pm 5) \text{ min}$	$\times (1,4 \pm 0,1)$
N100	$(1,1 \pm 0,1) \text{ d}$	Aufteilung in zwei Simulationen: Gewichtsfenstertechnik und analog	$(8,7 \pm 0,4) \text{ h}$	$\times (3,2 \pm 0,2)$
N60	$(2,4 \pm 0,1) \text{ d}$	Aufteilung in zwei Simulationen: Gewichtsfenstertechnik und analog	$(19,5 \pm 1,0) \text{ h}$	$\times (3,0 \pm 0,2)$
N15	$(3,6 \pm 0,2) \text{ d}$	Quell- und Geometrievereinfachungen mit energieunabhängigen Fenstern	$(2,6 \pm 0,1) \text{ h}$	$\times (33,1 \pm 2,3)$
		Zusätzlich: Vernachlässigung des dritten Elements	$(1,1 \pm 0,1) \text{ min}$	$\times (4880 \pm 350)$

Bei Bestrahlung mit Photonen aus ^{60}Co und ^{137}Cs kann nur eine eringe Verkleinerung der Rechenzeit erzielt werden. Die Aufteilung in zwei analoge Simulationen mit und ohne Wasserphantom steigert die Effizienz um 20% bei ^{60}Co bzw. 30% bei ^{137}Cs . Der Einsatz beider Varianten der Gewichtsfenstertechnik erzielt keinen zusätzlichen Zeitgewinn.

Die Aufteilung in zwei Simulationen zusammen mit der Gewichtsfenstertechnik kann hingegen die Berechnung der Dosiswerte für die N100-Röntgenquelle um 200% beschleunigen. Die Rechenzeit reduziert sich dadurch von einem Tag auf etwa acht Stunden. Die energieabhängige Gewichtsfenstertechnik erzielt keinen zusätzlichen Gewinn.

Für die N60-Bestrahlung wird ebenfalls eine Verdreifachung der Effizienz erreicht. Dies gelingt durch die Aufteilung in zwei Simulationen zusammen mit energieabhängiger Fenstertechnik. Der Einsatz energieabhängiger Gewichtsfenster ohne Aufteilung erzielt eine gleichwertige Verringerung der Rechenzeit von zweieinhalb Tagen auf 18 h. Der Vorteil der in Tabelle 4 aufgeführten Methode ist jedoch die Möglichkeit zur gleichzeitigen Berechnung beider Simulationsteile, was weitere zwei Stunden einsparen kann.

Bei Bestrahlung mit Photonen einer N15-Röntgenquelle lässt sich die Effizienz durch weitgehende Quell- und Geometrievereinfachungen auf etwa das Dreißigfache steigern. Die Rechenzeit sinkt von dreieinhalb Tagen auf fast drei Stunden. Hierbei ist jedoch der Unterschied zwischen analoger Methode und Gewichtsfenstertechnik geringfügig. Die Schwierigkeit liegt in der Berechnung der Dosis

des dritten Elements mit Bleifilter. Wird dessen geringer Wert vernachlässigt, so steigt die Effizienz um zwei Größenordnungen auf etwa das Fünftausendfache an. Statt dreieinhalb Tage benötigt die Simulation nur noch eine Minute. Hier erzielt die Gewichtsfenstertechnik nur einen zusätzlichen Faktor zwei. Da bei Photonenenergien unterhalb von 30 keV in Wasser der Photoeffekt dominiert, sinkt die mittlere freie Weglänge von etwa 5 cm bei 60 keV bzw. 100 keV auf 6 mm bei 15 keV. Dadurch können die umfassenden Quell- und Geometrieveränderungen, welche hauptsächlich für den Effizienzgewinn verantwortlich sind, nur bei der N15-Quelle vorgenommen werden.

Insgesamt benötigt die Lösung der Problemstellung ohne effizienzsteigernde Methoden etwa eine Woche. Durch die hier verwendeten Techniken reduziert sich die Rechenzeit auf einen Tag. Wird die Gewichtsfenstertechnik nicht eingesetzt, so werden vier volle Tage benötigt. In allen Fällen sind die energieunabhängige und die -abhängige Gewichtsfenstertechnik in etwa gleichwertig. Eine Bevorzugung gestreuter Photonen gelingt demnach nicht. Der Effizienzgewinn bei N100, N60 und N15 resultiert hauptsächlich aus der Teilchenvervielfachung durch Splitting beim Eindringen ins Phantom. Gleichzeitig wird der Anteil an Photonen, welcher in hintere Bereiche gelangt und dadurch mit geringerer Wahrscheinlichkeit Dosisbeiträge liefert, durch Russisch Roulette verringert.

In Abbildungen 66 sind beispielhaft die spektralen Verteilungen der Energiedepositionen unter Quell- und Geometrieveränderungen bei N15-Bestrahlung verglichen mit den Ergebnissen aus analoger Simulation ohne Modifikationen dargestellt. Die Standardunsicherheit aller Energiegruppen ist bei effizienzsteigernden Verfahren deutlich kleiner. Insbesondere die Form des Spektrums des dritten Elements ist ausgeprägter. Obwohl bei verkleinertem Phantom alle Dosiswerte im Rahmen ihrer Standardabweichung mit den Ausgangsergebnissen übereinstimmen (Anhang H), fehlt ein Teil des Spektrums im Energiebereich zwischen 2 keV und 7 keV. Diese hier nicht signifikante Veränderung des Ergebnisses ist eine Folge der Verkleinerung des Phantoms, was den Rückstreuanteil verringert.

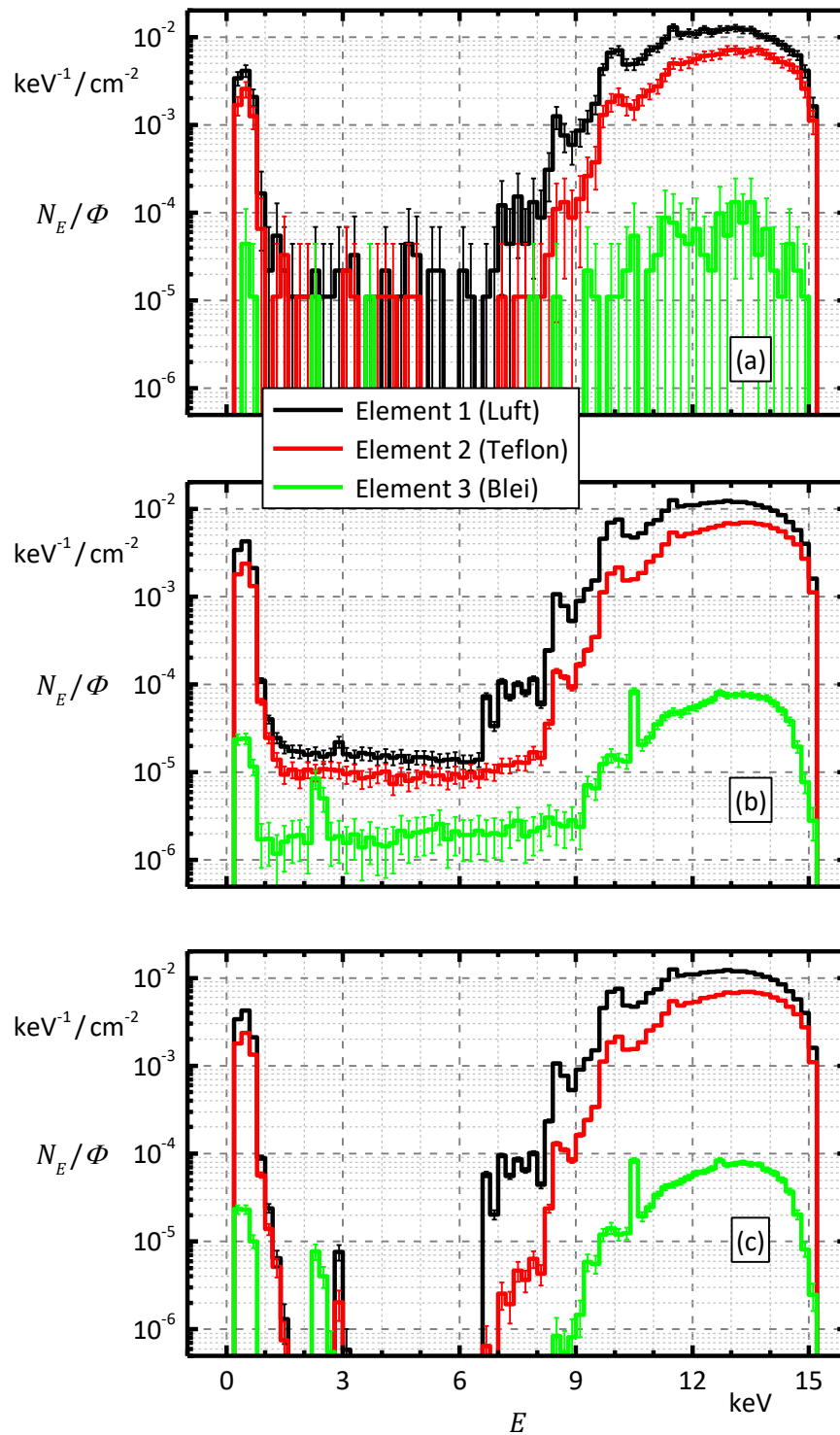


Abbildung 66: Spektrale Verteilung $N_E(E)$ der Energiedepositionen bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ (N15) für die drei Dosimisterelemente mit Luft-, Teflon- bzw. Bleifilter (99,73% Vertrauensbereich) mit je $4,3 \cdot 10^9$ Quellteilchen aus

- (a) analoger Simulation,
- (b) analoger Simulation mit verkleinerter Quelle,
- (c) analoger Simulation mit verkleinerter Quelle und kleinem Phantom

Energieunabhängige Gewichts Fenster

Die energieunabhängigen und -abhängigen Gewichts Fenster werden für alle Bestrahlungsszenarien mit Hilfe des iterativen Generators berechnet, wobei mit analoger Simulation gestartet wird. Die Gewichts Fenster werden erst gesetzt, wenn eine obere Schranke R_{\max} für die Standardunsicherheit der Teilchenwerte unterschritten ist. Entsprechend der Berechnungen zur tiefen Durchdringung gilt hier $R_{\max} = 30\%$.

Die energieunabhängigen Gewichts Fenster Grenzen für das voxelisierte Wasserphantom sind in Abbildung 67 anhand der Überlebensgewichte w_s dargestellt. Die obere bzw. die untere Grenze ergeben sich durch Multiplikation bzw. Division mit zwei. Die Resultate bei ^{137}Cs - und ^{60}Co -Bestrahlung unterscheiden sich nur geringfügig, weshalb stellvertretend die ^{60}Co -Ergebnisse gezeigt werden.

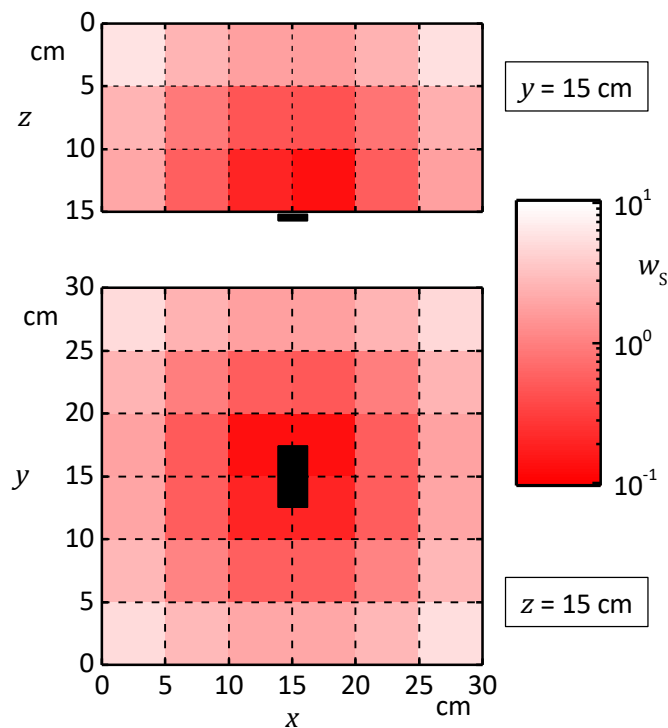


Abbildung 67: Vom Gewichts Fenster Generator berechnete energieunabhängige Überlebensgewichte w_s im Wasserphantom bei ^{60}Co -Bestrahlung

Mit größerem Abstand folgt der Teilchenwert in allen Richtungen vom Dosimeter ausgehend dem exponentiellen Schwächungsgesetz. Folglich kommen größten Beiträge aus der direkten Umgebung des Dosimeters und mit zunehmenden Abstand schwindet der mittlere Beitrag in alle Richtungen etwa gleichmäßig exponentiell. Die Gewichts Fenster Technik sorgt mit $w_s \approx 0,1$ in der Umgebung des Dosimeters für eine Vergrößerung der Teilchenpopulation durch Quellteilchensplitting im Verhältnis 1: 10. Im größeren Abstand bei $w_s \approx 1$ bleiben Quellteilchen bestehen, während sie bei $w_s \approx 10$ am Rand des Phantoms Russisch Roulette nur mit einer Wahrscheinlichkeit von etwa 10% überleben.

Die Ursache für das gleiche Gewichtsfensterergebnis bei ^{137}Cs - (661,6 keV) und bei ^{60}Co -Bestrahlung (1173,2 keV und 1332,5 keV) ist die nahezu isotrope Abstrahlung bei Rückstreuung im Phantom [123, 144]. Zwar sind die Wahrscheinlichkeiten für Rückstreuung mit anschließender Wechselwirkung im Dosimeter unterschiedlich. Jedoch verändert dies nicht den relativen Unterschied zwischen den Teilchenwerten der einzelnen Voxel im Phantom, mit welchem die Überlebensgewichte skalieren.

In Abbildung 68, links, sind die berechneten Überlebensgewichte w_s in der dosimeternahen Schicht des Voxelphantoms unter N100- und N60-Bestrahlung verglichen mit ^{137}Cs -Bestrahlung dargestellt. Den Verlauf entlang der Tiefe des Phantoms zeigt das rechte Diagramm in Abbildung 68. Das Verhalten ist bei allen Quelltypen identisch. Auch für N60 und N100 ergibt sich eine exponentielle Schwächung des Teilchenwerts in alle Raumrichtungen ausgehend vom Dosimeter wie bei ^{137}Cs -Bestrahlung. Jedoch sinken die mittleren Beiträge stärker mit zunehmender Energie, wodurch die Überlebensgewichte stärker ansteigen.

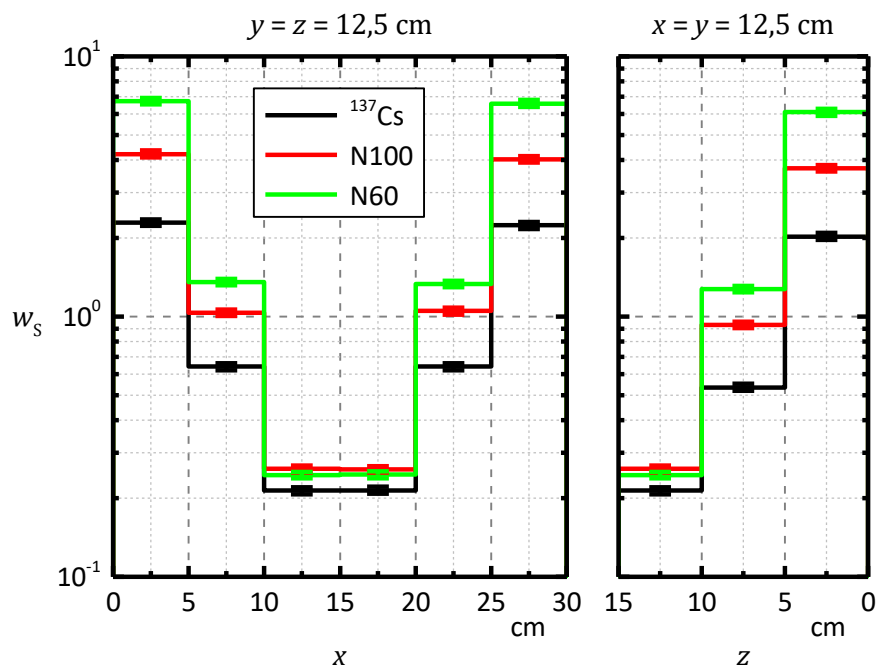


Abbildung 68: Vom Gewichtsfenstergenerator berechnete energieunabhängige Überlebensgewichte w_s im Wasserphantom bei N100- und N60-Bestrahlung im Vergleich zu den Ergebnissen der ^{137}Cs -Bestrahlung (99,73% Vertrauensbereich)

Beim Test der unterschiedlichen Ansätze zur Effizienzsteigerung unter N15-Bestrahlung zeigt sich zunächst, dass die Gewichtsfenstertechnik den analogen Monte Carlo Methoden bei der Quell- und Geometrievereinfachung unterlegen ist. Erst durch die Vernachlässigung des Elements 3 mit Bleifilter gelingt eine Verringerung der Rechenzeit. Die Ursache ist das Ergebnis des Detektors mit Bleifilter. Unter Einsatz der Gewichtsfenster ist dessen Messabweichung deutlich größer. Gleichzeitig erzielen die beiden anderen Detektorergebnisse eine höhere Genauigkeit. Die Fenstertechnik sorgt demnach für eine Bevorzugung der Beiträge in den Elementen 1 und 2. Dies ist eine Folge der Zusammenfas-

sung aller drei Elemente zu einem Detektor in der Generatorsimulation. Wird hingegen das dritte Element als einziger Detektor bei der Gewichtsfensterberechnung eingesetzt, so resultieren die ermittelten Grenzen in einer deutlich größeren Rechenzeiteinsparung. Die dazugehörigen Überlebensgewichte im Phantom sind in Abbildung 69 dargestellt. Aufgrund zu weniger Beiträge können hier nicht für alle Voxel die Fenstergrenzen berechnet werden. In diesen wird stattdessen eine globale untere Grenze gesetzt, welche sich am kleinsten bekannten Überlebensgewicht orientiert.

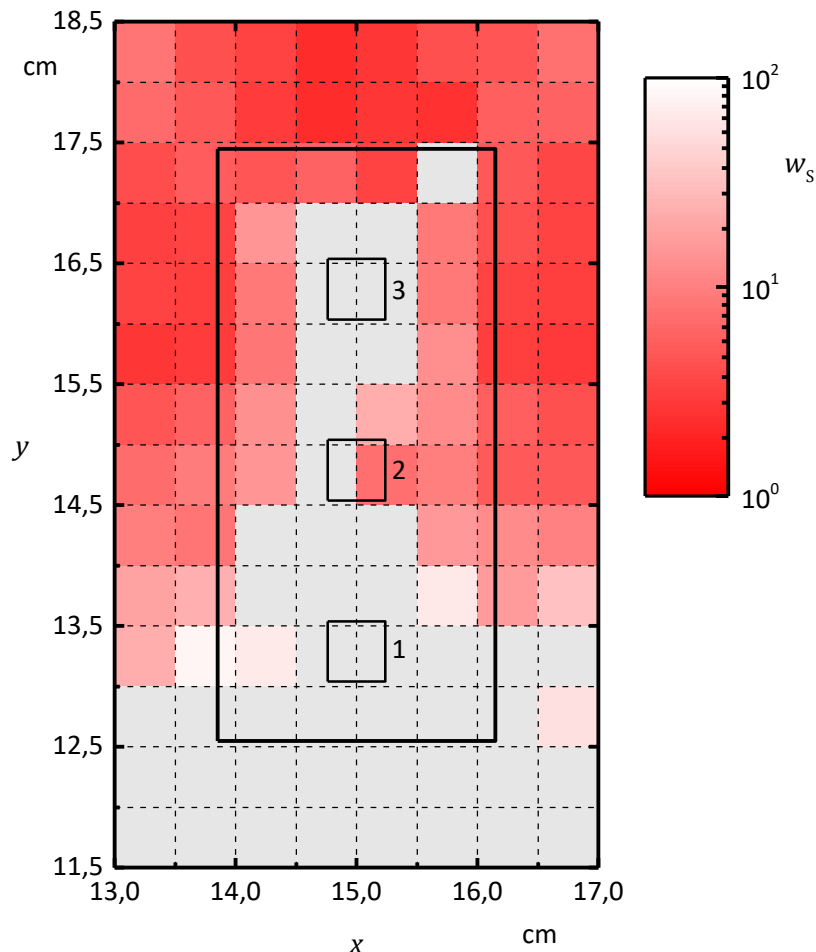


Abbildung 69: Vom Gewichtsfenstergenerator berechnete energieunabhängige Überlebensgewichte w_s im verkleinerten Wasserphantom mit kleinem Strahlungsfeld bei N15-Bestrahlung und Definition des dritten Elements (Bleifilter) als alleinigen Detektor

Insbesondere in den Randbereichen sind die Überlebensgewichte um nahezu zwei Größenordnungen kleiner, während diese im Bereich der BeO-Chips zunehmen. Die Ursache ist der 0,9 mm dicke Bleifilter, in welchem sowohl alle vorn auftreffenden als auch alle im Phantom rückgestreuten Photonen absorbiert werden. Die Transmission von Photonenstrahlung der Energie 15 keV durch den Bleifilter beträgt theoretisch $3,4 \cdot 10^{-50}$ [123]. Detektorbeiträge kommen somit nur durch seitliches Einstreuen zu Stande. Für die Filterumgebung ergibt sich $w_s \approx 0,1$. Der Luft- und der Bleifilter selbst erhalten hingegen ein Überlebensgewicht im Bereich von 10, während für den Teflonfilter $w_s = 0,6$ gilt. Die größten Beiträge kommen demnach aus Richtung des Teflonfilters.

Energieabhängige Gewichtsfenster

Die Aufteilung der Raumbereiche in energieabhängige Zellen erfolgt anhand der Energien im Phantom rückgestreuter Photonen und ist in Tabelle 5 aufgelistet. Je nach Wechselwirkungsort liegt diese Energie bei inkohärenter Streuung zwischen 180 keV und 290 keV für ^{137}Cs und zwischen 210 keV und 370 keV für ^{60}Co [6]. Bei kohärenter Streuung bleibt zwar die Quellenergie erhalten, die Wahrscheinlichkeit für diese Wechselwirkung ist jedoch bei allen Quellenergien vernachlässigbar klein [123]. Für ^{60}Co kann noch die Energie der Annihilationsphotonen von 511 keV berücksichtigt werden. Diese entstehen in Folge der Paarbildung. Bei der Berechnung der Gewichtsfenster für diese Energiegruppeneinteilung kommt der Algorithmus zur Vereinigung von benachbarten Zellen im Rahmen einer iterativen Simulation zum Einsatz.

Tabelle 5: Energiegruppeneinteilung E_g für energieabhängige Gewichtsfenster im Phantom

E_g in keV für ^{60}Co			E_g in keV für ^{137}Cs		
0	300	520	0	230	290
200	320	1170	180	240	650
220	340	1330	190	250	670
240	360	1340	200	260	
260	380		210	270	
280	510		220	280	

Bei allen drei Röntgenquellen ist die Gruppeneinteilung bei energieabhängigen Fenstern äquidistant. Für N100 beträgt die Gruppenbreite $\Delta E = 10$ keV, für N60 ist $\Delta E = 5$ keV und für N15 gilt $\Delta E = 1$ keV.

In Abbildung 70 sind die vom Gewichtsfenstergenerator berechneten energieabhängigen Überlebensgewichte w_S in der Mitte und an einem Eckpunkt der Vorderseite des Wasserphantoms bei ^{137}Cs -Bestrahlung dargestellt. In der Phantommitte erfolgt eine Bevorzugung der rückgestreuten Photonen durch geringere Fenstergrenzen als bei Energien im Bereich der Vorwärtsstreuung. Im Eckpunkt des Phantoms wird insbesondere die Streuung um 90° durch einen geringeren Wert für w_S hervorgehoben. Folglich sorgen die energieabhängigen Gewichtsfenster für eine Begünstigung von Photonen, deren polarer Streuwinkel im Bereich des Winkels zwischen der Einfallrichtung im jeweiligen Voxel und der Flugrichtung in Richtung des Dosimeters liegt. Bezüglich des azimuthalen Streuwinkels kann die Gewichtsfenstertechnik jedoch nicht selektieren.

Die energieabhängigen Gewichtsfenstergrenzen bei ^{60}Co -Bestrahlung zeigen das gleiche Verhalten. Auch hier werden rückgestreute Photonen in der Phantommitte und um 90° gestreute Photonen am Rand des Wasserphantoms bevorzugt. Der Bereich um 511 keV hebt sich nicht hervor. Der Anteil an Annihilationsphotonen im Dosimeter ist vernachlässigbar, da die Wahrscheinlichkeit für Paarbildung in Wasser bei 1,25 MeV noch unter 0,3‰ liegt.

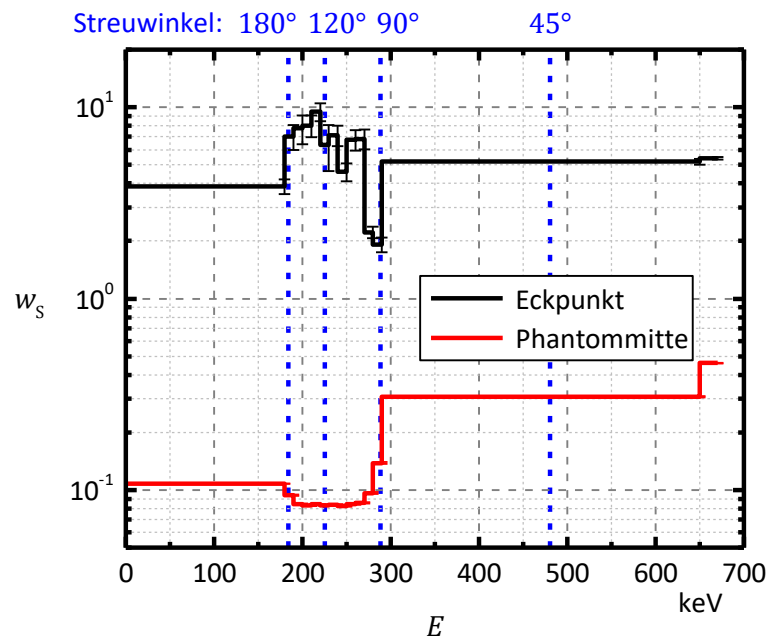


Abbildung 70: Vom Gewichtsfenstergenerator berechnete energieabhängige Überlebensgewichte w_s in der Mitte und an einem Eckpunkt der dosimeternahen Schicht des Wasserphantoms bei ^{137}Cs -Bestrahlung (99,73% Vertrauensbereich)

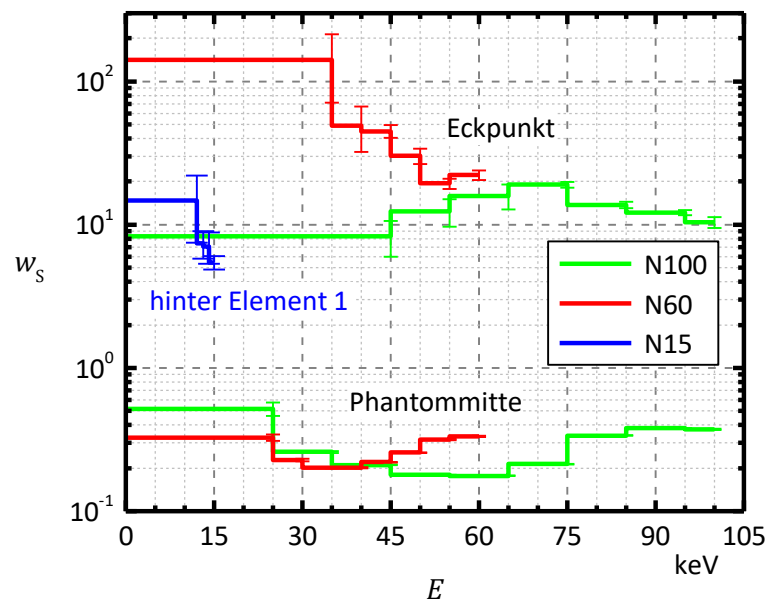


Abbildung 71: Vom Gewichtsfenstergenerator berechnete energieabhängige Überlebensgewichte w_s in der Mitte und an einem Eckpunkt der dosimeternahen Schicht des Wasserphantoms bei N100-, bei N60- und bei N15-Bestrahlung (99,73% Vertrauensbereich)

Die Abhängigkeit der berechneten Fenster von der Energie für Bestrahlung aus Röntgenquellen ist in Abbildung 71 dargestellt. Die Verläufe beziehen sich jeweils auf ein Voxel in der Phantommitte und in einem Eckpunkt. Bei N15-Bestrahlung kann keine Energieabhängigkeit an den Randbereichen des Dosimeters aufgrund zu weniger Beiträge bestimmt werden. Daher ist in Abbildung 71 nur das Ergebnis aus einem der Voxel hinter dem Element 1 gezeigt.

Es wird deutlich, dass die Fenstergrenzen in einem Eckpunkt bei N100 und N60 im gleichen Gewichtsbereich liegen, wie bei N15 hinter dem ersten Element. Bei letzterem ist der mittlere Beitrag aus dem Phantom folglich mehr als eine Größenordnung kleiner. Außerdem werden hier nur Energien im Bereich von 13 keV bis 15 keV bevorzugt, welche den Energien rückgestreuter Photonen aus dem Bereich des Emissionsmaximums entsprechen.

In der Phantommitte bei N60- und N100-Bestrahlung werden in etwa die Verläufe der Emissionsspektren wiedergeben. Die größten Energien besitzen die größten Überlebensgewichte. Zu kleineren Energien hin sinkt das Überlebensgewicht bis zu einem breiten Minimum und steigt danach wieder an. Das Minimum erstreckt sich von 30 keV bis 40 keV bzw. von 45 keV bis 65 keV. In diese Bereiche fallen nicht nur um 180° inkohärent gestreute Photonen, sondern auch mehrfach inkohärent gestreute. Diese müssen daher auch aus entfernteren Bereichen des Wasserphantoms stammen, da Streuung um kleinere Winkel wahrscheinlicher ist, als Rückstreuung [123, 144]. Dadurch ergibt sich insbesondere in den Eckpunkten des Wasserphantoms eine Bevorzugung von hochenergetischen Photonen, welche höchsten um kleine Winkel gestreut werden. Dies spiegelt sich in den Verläufen für einen Eckpunkt wieder. Das Überlebensgewicht sinkt bei N100 im Gegensatz zu N60 wieder bei kleineren Energien. Dieses Verhalten zeigt sich auch schon bei ^{60}Co - und ^{137}Cs -Bestrahlung. Die Ursache ist der größere Beitrag durch Photonen, welche aus tieferen Schichten zunächst rückgestreut und anschließend in Richtung Dosimeter weitergestreut werden.

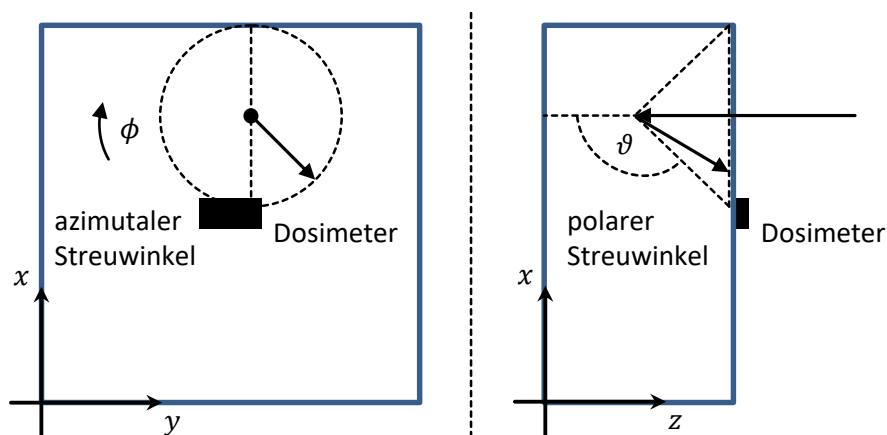


Abbildung 72: Polarer und azimuthaler Streuwinkel eines im Phantom in Richtung des Dosimeters zurück gestreuten Photons

Für alle Strahlenqualitäten gilt, dass die Bevorzugung bestimmter Streuenergien mittels Gewichtsfenstertechnik zu keiner zusätzlichen Verbesserung der Rechenzeit gegenüber energieunabhängiger Fenster führt. Zwar kann durch die Selektion der Streuenergie ein bestimmter azimuthaler Rückstreuungswinkel in Richtung Dosimeter bevorzugt werden, jedoch lässt sich der energieunabhängig gleichverteilte polare Streuwinkel nicht beeinflussen. Dies ist in Abbildung 72 skizziert. Dadurch müssen mehr Splittingfragmenten simuliert werden, welche entweder gar nicht oder erst durch Umwege zum Dosimeter gelangen. Diese mehrfach gestreuten Photonen sorgen für eine größere Varianz der Gewichtsverteilung im Ergebnis, was sich anhand einer größeren Dosisunsicherheit zeigt. Folglich wird mehr Rechenzeit zum Erreichen der geforderten Standardunsicherheit benötigt.

Ausblick

Andere effizienzsteigernde Methoden könnten für diese Problemstellung zu einer weiteren Verringerung der Rechenzeit führen. Dazu gehört insbesondere die richtungsabhängige Gewichtsfenstertechnik, welche den Flug in Richtung Dosimeter von jedem Bereich im Wasserphantom bevorzugen würde. Den gleichen Effekt erzielt die Exponentialtransformation, welche die totale mittlere freie Weglänge in Richtung Dosimeter vergrößert und in andere Richtungen verkleinert. Die Wahrscheinlichkeit einer Wechselwirkung wird dadurch in Richtung Dosimeter verringert. Dies muss mittels Gewichts-anpassung kompensiert werden, wobei starke Fluktuation in den Gewichten entstehen. Diese können wiederum mit Hilfe der Gewichtsfenstertechnik kontrolliert werden [96].

Diese Techniken sind jedoch darauf angewiesen, dass eine Streuung in diese Richtung zufällig stattfindet. Dieses Problem kann mit Hilfe der erzwungenen Wechselwirkung gelöst werden. Durch Teilchensplitting wird an jedem Wechselwirkungspunkt ein Fragment erzeugt, welches in Richtung Dosimeter gestreut wird. Das Teilchengewicht wird entsprechend der Streuwahrscheinlichkeit angepasst. Damit dieses Teilchen dann in jedem Fall das Dosimeter erreicht und einen Beitrag liefert, kann es direkt zum Dosimeter ohne Wechselwirkung transportiert werden. Das Gewicht muss dann entsprechend der Transmissionswahrscheinlichkeit angepasst werden. Im Dosimeter ist anschließend wieder eine Wechselwirkung zu erzwingen.

Diese speziellen, auf die Gewichtsfenstertechnik angewiesenen Methoden konnten bisher noch nicht im Strahlungstransportprogramm AMOS implementiert werden. Mit Hilfe der in dieser Arbeit gelegten Grundlagen ist es jedoch möglich, die zugehörigen Algorithmen in zukünftigen Arbeiten zu konzipieren und umzusetzen.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung und Implementation eines orts- und energieabhängigen Gewichtsfenstergenerators für das Strahlungstransportprogramm AMOS. Dazu wurde die Gewichtsfenstertechnik vollständig für die Monte Carlo Schätzer der spektralen Fluenz und der spektralen Energiedeposition implementiert. Der darauf aufbauende vorwärts-adjungierte Generator ist in der Lage, die berechneten Fenster selbstständig zu setzen und iterativ anzupassen.

Die Grundlage bildeten die Arbeiten von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS zum vorwärts-adjungierte Generator, welcher die Fenstergrenzen über die adjungierte Strahlungsfeldgröße Teilchenwert (Importance) innerhalb einer vorwärts gerichteten Monte Carlo Simulation berechnet. Mit Hilfe eines in dieser Arbeit entwickelten Algorithmus besteht die Möglichkeit, die Gewichtsfenster von benachbarten Energieintervallen zusammenzufassen. Basierend auf der statistischen Messunsicherheit des Teilchenwerts wird so die Einteilung energieabhängiger Fenster durch den Generator selbstständig festgelegt.

Um große Schwankungen der Grenzen zu vermeiden, werden die Überlebensgewichte erst bei Unterschreiten einer benutzerseitig bestimmten relativen Standardunsicherheit des Teilchenwerts berechnet. Alternativ werden globale Gewichtsfenster gesetzt. Auf Wunsch werden die Gewichtsfenster solange iterativ berechnet, bis das im Rahmen der Problemstellung zu ermittelnde Ergebnis mit ausreichender Genauigkeit geschätzt ist.

Die Verwendung des Generators erfolgt mit dem Ziel, die Effizienz von Monte Carlo Methoden zu verbessern und dadurch Rechenzeit einzusparen. Dass dies möglich ist, wurde anhand des Problems der tiefen Durchdringung von Photonenstrahlung bewiesen. Mit Hilfe des iterativen Generators gelingt es, die Schwächung der Photonenfluenz aus ^{137}Cs schrittweise und unter Verwendung bereits bekannter Ergebnisse bis zu einer Bleiabsorbertiefe von dreißig mittleren freien Weglängen zu berechnen. Analoge Methoden scheitern praktisch an einer Lösung bereits ab dreizehn Weglängen. Die Effizienz kann so um viele Größenordnungen gesteigert werden.

Die iterative Berechnung energieabhängiger Fenstergrenzen erzielt jedoch keine signifikante Verbesserung der Effizienz. Die zu berechnende spektrale Fluenz ist bereits mit ausreichender Genauigkeit ermittelt, bevor genügend Informationen über die Energieabhängigkeit der Überlebensgewichte gesammelt werden können. Wird die Simulation hingegen fortgesetzt, ergeben sich letztendlich Gewichtsfenstergrenzen mit einem weiteren Effizienzgewinn von etwa einer Größenordnung.

Da die Gewichtsfenstertechnik speziell zur Lösung des Problems der tiefen Durchdringung entwickelt wurde, ist die Betrachtung von allgemeineren Aufgabenstellungen von besonderem Interesse. Bei der Durchdringung liegt die Schwierigkeit in der Berechnung der Absorption. Im Allgemeinen können jedoch auch gestreute Photonen einen signifikanten Beitrag zum Ergebnis liefern. Anhand eines hypothetischen Beispiels ließ sich zunächst zeigen, dass die Gewichtsfenstertechnik prinzipiell auch in Streuproblemen zu einer Verringerung der Rechenzeit beitragen kann.

Als praktisches Beispiel wurde in dieser Arbeit die Kalibrierung eines auf einem Wasserphantom befestigten Dosimeters betrachtet. Dies stellt insbesondere bei der Entwicklung von Personendosimetern eine zentrale Problemstellung dar. Die Schwierigkeit liegt hier in der effizienten Berechnung der im Phantom zurückgestreuten Photonen. Neben energieabhängigen Gewichtsfenstern wurden auch weiterführende Quell- und Geometrievereinfachungen angewandt und hinsichtlich der Effizienzsteigerung miteinander verglichen.

Für hochenergetische Photonenstrahlung aus ^{137}Cs und ^{60}Co konnte durch Geometrievereinfachungen eine Effizienzverbesserung von 30% bzw. 20% erzielt werden. Erst bei Röntgenstrahlung der N-Serie im schmalen Energiebereich unterhalb 100 keV kann sowohl durch Quell- und Geometrievereinfachung als auch durch vom Generator berechnete Gewichtsfenster Rechenzeit eingespart werden. Im Gegensatz zur tiefen Durchdringung erzielt die Gewichtsfenster-technik hier jedoch nicht mehr als eine Vervielfachung der Effizienz. Ein wesentlicher Anteil wird durch die anderen effizienzsteigernden Maßnahmen verursacht. Weiterhin zeigt sich, dass energieabhängige Fenster in keinen zusätzlichen Effizienzgewinn resultieren. Demnach ist die Verringerung der Rechenzeit nicht auf eine Bevorzugung gestreuter Photonen zurückzuführen, sondern auf Teilchenvervielfachung durch Splitting beim Eindringen in das Wasserphantom. Gleichzeitig verkürzt Russisch Roulette die Lebensgeschichten von Teilchen in den hinteren Bereichen des Phantoms.

Insgesamt reduziert sich die Rechenzeit für dieses Anwendungsbeispiel von etwa einer Woche auf einen Tag, ohne Gewichtsfenster-technik auf vier Tage. Dabei bleibt jedoch die Berechnungszeit für die Fenstergrenzen unberücksichtigt. Es handelt sich hierbei um vielfach durchzuführende Simulationen mit nur geringen Veränderungen im Dosimeterdesign, wodurch eine einmalige längerfristige Berechnung optimaler Parameter insgesamt zu einer deutlichen Verringerung des Rechenaufwands führt. Würde nur ein einziges Dosimeterdesign getestet, lohnte sich der Einsatz der Gewichtsfenster-technik hier nicht, denn alle Generatorsimulationen benötigten mehr Zeit als die entsprechenden analogen Monte Carlo Methoden.

Die iterative Berechnung der Gewichtsfenster sorgt für eine Bevorzugung von vergleichsweise großen und häufigen Beiträgen. Liegt der Fokus hingegen auf seltenen Beiträgen, so kann dies durch Quell- oder Geometrieveränderungen auf den Generator übertragen werden. Insbesondere für das simulierte Personendosimeter mit drei Detektorelementen ergaben sich bei N15-Bestrahlung deutlich effizientere Gewichtsfenster, wenn nur das Element mit Bleifilter und dem unsichersten Dosiswert als Monte Carlo Detektor definiert wurde, anstatt alle Elemente mit Luft-, Teflon bzw. Bleifilter gleich zu bewerten.

Anhand der in dieser Arbeit betrachteten Beispiele lässt sich schlussfolgern, dass der Einsatz des Gewichtsfenstergenerators bei Problemen mit tiefer Durchdringung oder Simulationsaufgaben mit mehrfacher Wiederholung bei geringen Geometrievariationen lohnenswert ist. Für die tiefe Durchdringung eines dicken Absorbers werden jedoch Startgewichtsfenster benötigt, welche in dieser Arbeit durch sukzessive Vergrößerung des Absorbers auf die geforderte Dicke berechnet wurden. Im Allgemeinen sollten vorrangig mögliche Quell- und Geometrievereinfachungen zur Steigerung der Effizienz geprüft werden.

Mit dem in dieser Arbeit entwickelten Gewichtsfenstergenerator für Photonenstrahlung sind die Voraussetzungen für weitergehende effizienzsteigernde Methoden geschaffen. Dazu gehören insbesondere Exponentialtransformation und gezwungene Wechselwirkung, welche die Erwartungstreue des Schätzers mittels Veränderungen des Teilchengewichts erhalten. Zu große Schwankungen müssen hierbei mit Hilfe der Gewichtsfenstertechnik verhindert werden. Beide Techniken können letztendlich zu einer weiteren Effizienzverbesserung der Simulation der Kalibrierung von Personendosimetern führen.

Der entwickelte Algorithmus zur Vereinigung von benachbarten Energieintervallen kann prinzipiell auf die Vereinigung von Raumbereichen erweitert werden. Dazu ist jedoch ein Konzept zur automatischen Identifikation benachbarter Bereiche zu erarbeiten. Die Schwierigkeit besteht außerdem in der Vielzahl an Möglichkeiten zur Vereinigung, da die Anzahl an Nachbarn nicht begrenzt ist. Hier könnte die Überlagerung der Geometrie mit einem Voxelraster entsprechend der Idee von L. LIU und R.P. GARDNER hilfreich sein, wobei der Teilchenwert zunächst in jedem einzelnen Voxel und anschließend in vereinigten Voxeln berechnet wird. Die Anzahl nächster Nachbarn beträgt hier maximal sechs. Hierbei muss jedoch der Einfluss von Grenzflächen innerhalb eines Voxel untersucht werden.

Durch den Vergleich mit den Ergebnissen des Generators können nun alternative Verfahren zur Berechnung der Teilchenwerte untersucht werden. Dazu gehören die on-the-fly-Methode von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS, vereinfachte deterministische Verfahren und adjungierte Monte Carlo Methoden. Außerdem ist eine Erweiterung auf richtungsabhängige Gewichtsfenster möglich.

Neben dem Photonentransport bietet AMOS noch die Möglichkeit zur Simulation von Elektronen, Positronen und Neutronen. Prinzipiell kann der entwickelte Generator für Photonen auch auf die anderen Teilchen, insbesondere auf Neutronen, übertragen werden. Inwiefern ein Teilchengewicht und ein entsprechender Generator für geladene Teilchen eine Rechenzeiteinsparung bewirken kann, muss in weiterführenden Arbeiten untersucht werden.

6 Literatur

- [1] ICRP: „Publication 103 - Recommendations of the International Commission on Radiological Protection“, Ann. ICRP, 37, 2007.
- [2] ICRP: „Publication 60 - Recommendations of the International Commission on Radiological Protection“, Ann. ICRP, 33, 1990.
- [3] ICRP: „Publication 26 - Recommendations of the International Commission on Radiological Protection“, Ann. ICRP, 1, 1977.
- [4] RAT DER EUROPÄISCHEN UNION: „RICHTLINIE 2013/59/EURATOM DES RATES vom 5. Dezember 2013 zur Festlegung grundlegender Sicherheitsnormen für den Schutz vor den Gefahren einer Exposition gegenüber ionisierender Strahlung und zur Aufhebung der Richtlinien 89/618/Euratom, 90/641/Euratom, 96/29/Euratom, 97/43/Euratom und 2003/122/Euratom“. 2013.
- [5] BUNDESMINISTERIEN FÜR UMWELT, NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT, FÜR GESUNDHEIT, FÜR VERKEHR, BAU- UND WOHNUNGSWESEN: „Gesetz zur Neuordnung des Rechts zum Schutz vor der schädlichen Wirkung ionisierender Strahlung“. 2017.
- [6] W. STOLZ: „Radioaktivität: Grundlagen - Messung - Anwendungen“. Wiesbaden: Teubner, 2005.
- [7] H. KRIEGER: „Strahlungsquellen für Technik und Medizin“. Springer-Verlag, 2013.
- [8] H. KRIEGER: „Grundlagen der Strahlungsphysik und des Strahlenschutzes“. Springer Science & Business Media, 2012.
- [9] H. KRIEGER: „Strahlungsmessung und Dosimetrie“, 2011. Aufl. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, 2011.
- [10] H. KAHN: „Applications of Monte Carlo“, RAND Corp., Santa Monica, Calif., 1954.
- [11] J. SPANIER, E.M. GELBARD: „Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems“. Addison-Wesley, 1969.
- [12] L.L. CARTER, E.D. CASHWELL: „Particle transport simulation with the Monte Carlo method“. Technical Information Center, Office of Public Affairs, U.S. Energy Research and Development Administration, 1975.
- [13] W.W. ENGLE JR: „A USERS MANUAL FOR ANISN: A ONE DIMENSIONAL DISCRETE ORDINATES TRANSPORT CODE WITH ANISOTROPIC SCATTERING.“, Oak Ridge Gaseous Diffusion Plant, Tenn., 1967.
- [14] W.A. RHOADES, F.R. MYNATT: „DOT III two-dimensional discrete ordinates transport code“, Oak Ridge National Lab., Tenn.(USA), 1973.
- [15] W.A. RHOADES, R.L. CHILDS: „TORT-DORT: Two and Three-Dimensional Discrete-Ordinates Transport“, Radiat. Shield. Inf. Cent. Oak Ridge Natl. Lab. CCC-543, 1993.
- [16] I. LUX, L. KOBLINGER: „Monte Carlo particle transport methods: neutron and photon calculations“. CRC Press, 1991.
- [17] H. KAHN: „Use of Different Monte Carlo Sampling Techniques“. Rand Corporation, 1955.

-
- [18] M.H. KALOS: „Importance Sampling In Monte Carlo Shielding Calculations .1. Neutron Penetration Through Thick Hydrogen Slabs“, Nucl. Sci. Eng., 16 (2), 227–, 1963.
- [19] J.-M. LANORE: „Weighting and biasing of a Monte Carlo calculation for very deep penetration of radiation“, Nucl. Sci. Eng., 45 (1), 66–72, 1971.
- [20] H. KALLI: „On the Variance Reduction Techniques In Monte-Carlo Solutions of Neutron-Transport Problems“, Acta Polytech. Scand.-Phys. Nucleon. Ser., (89), 7–25, 1972.
- [21] T.E. BOOTH, J.S. HENDRICKS: „Deep Penetration by Monte Carlo“, Trans Am Nucl Soc U. S., 43, 1982.
- [22] I. LUX: „A continuous model for the optimization of splitting in deep-penetration Monte Carlo“, 1983.
- [23] T.E. BOOTH, J.S. HENDRICKS: „Importance Estimation In Forward Monte-carlo Calculations“, Nucl. Technol.-Fusion, 5 (1), 90–100, 1984.
- [24] A. DUBI, A. GOLDFELD, K. BURN: „Application of the Single Surface Extended Model of Geometrical Splitting In Monte-carlo“, Nucl. Sci. Eng., 91 (4), 470–480, 1985.
- [25] S.N. CRAMER, J.S. TANG: „Variance Reduction Methods Applied to Deep-Penetration Monte Carlo Problems“, Oak Ridge National Lab., TN (USA), ORNL/TM-9643, 1986.
- [26] P.C. MILLER, G.A. WRIGHT, C.B. BOYLE, S.W. POWER: „The use of an inbuilt importance generator for acceleration of the Monte Carlo code MCBEND“, 1990.
- [27] T.E. BOOTH: „Monte-Carlo Variance Reduction Approaches for Non-Boltzmann Tallies“, Los Alamos Natl. Lab. Rep., (LA-12433), 1992.
- [28] M.W. MICKAEL: „A fast, automated, semideterministic weight windows generator for MCNP“, Nucl. Sci. Eng., 119 (1), 34–43, 1995.
- [29] I. MURATA, R. SHINDO, S. SHIOZAWA: „Importance Determination Method For Geometry Splitting With Russian Roulette In Monte-carlo Calculations of Thick and Complicated Core Shielding Structure“, J. Nucl. Sci. Technol., 32 (10), 971–980, 1995.
- [30] K.A. VAN RIPER, T.J. URBATSCH, P.D. SORAN: „AVATAR - Automatic variance reduction in Monte Carlo calculations“, Jt. Int. Conf. Math. Methods Supercomput. Nucl. Appl. Saratoga Springs NY U. S. 6-10 Oct 1997, 1, 661–671, 1997.
- [31] T.M. EVANS, J.S. HENDRICKS: „An enhanced geometry-independent mesh weight window generator for MCNP“, Los Alamos National Lab., NM (United States). Funding organisation: USDOE, Washington, DC (United States), 1997.
- [32] L. LIU, R.P. GARDNER: „A geometry-independent fine-mesh-based Monte Carlo importance generator“, Nucl. Sci. Eng., 125 (2), 188–195, 1997.
- [33] S.A. TURNER, E.W. LARSEN: „Automatic variance reduction for three-dimensional Monte Carlo simulations by the local importance function transform .1. Analysis“, Nucl. Sci. Eng., 127 (1), 22–35, 1997.
- [34] S.A. TURNER, E.W. LARSEN: „Automatic variance reduction for three-dimensional Monte Carlo simulations by the local importance function Transform .2. Numerical results“, Nucl. Sci. Eng., 127 (1), 36–53, 1997.

-
- [35] M.A. COOPER, E.W. LARSEN: „Automated weight windows for global Monte Carlo particle transport calculations“, Nucl. Sci. Eng., 137 (1), 1–13, 2001.
 - [36] A. HAGHIGHAT, J.C. WAGNER: „Monte Carlo variance reduction with deterministic importance functions“, Prog. Nucl. Energy, 42 (1), 25–53, 2003.
 - [37] J.S. HENDRICKS, G.W. MCKINNEY: „Pulse-Height Tallies with Variance Reduction“, in *Proceedings of the ANS Monte Carlo 2005 Topical Meeting*, 2005, 17–21.
 - [38] B. DIONNE: „Automated Variance Reduction Technique for 3-D Monte Carlo Coupled Electron-Photon-Positron Simulation Using Deterministic Importance Functions“, University of Florida, 2007.
 - [39] I. MURATA, D. FILGES, F. GOLDENBAUM: „A new approach to estimate importance for weight window in forward Monte Carlo calculations“, Nucl. Sci. Eng., 159 (3), 273–283, 2008.
 - [40] J.C. WAGNER, D.E. PELOW, T.M. EVANS: „Automated Variance Reduction Applied To Nuclear Well-logging Problems“, Nucl. Technol., 168 (3), 799–809, 2009.
 - [41] A.J. VAN WIJK, G. VAN DEN EYNDE, J.E. HOOGENBOORN: „An easy to implement global variance reduction procedure for MCNP“, Ann. Nucl. Energy, 38 (11), 2496–2503, 2011.
 - [42] X. FAN, G. ZHANG, K. WANG: „Development of new variance reduction methods based on weight window technique in RMC code“, Prog. Nucl. Energy, 90, 197–203, 2016.
 - [43] J.A. WALSH, P.K. ROMANO, B. FORGET, K.S. SMITH: „Optimizations of the energy grid search algorithm in continuous-energy Monte Carlo particle transport codes“, Comput. Phys. Commun.
 - [44] K. HELBIG: „Entwicklung eines Neutronentransportmoduls für das Strahlungstransportprogramm AMOS“. Dissertation, TU Dresden, 2013.
 - [45] J. MASSA: „Optimización del Cálculo de Dosis en Radioterapia“, INTIA - Instituto de Investigación en Tecnología Informática Avanzada Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires, Tandil, 2012.
 - [46] J. DOORN, J. MASSA: „Low-Coupled Parallel Strategy for Monte Carlo Radiation Dose Calculation“, Conf. Proc. Annu. Int. Conf. IEEE Eng. Med. Biol. Soc. IEEE Eng. Med. Biol. Soc. Conf., 2010, 1771–1774, 2010.
 - [47] R. WAINSCENKER, J. MASSA: „Time improvement of photoelectric effect calculation for absorbed dose estimation“, J. Phys. Conf. Ser., 90 (1), 012048, 2007.
 - [48] T. LIU, X.G. XU, C.D. CAROTHERS: „Comparison of two accelerators for Monte Carlo radiation transport calculations, Nvidia Tesla M2090 GPU and Intel Xeon Phi 5110p coprocessor: A case study for X-ray CT imaging dose calculation“, Ann. Nucl. Energy, 82, 230–239, 2015.
 - [49] A. BADAL, A. BADANO: „SU-E-I-68: Fast and Accurate Estimation of Organ Doses in Medical Imaging Using a GPU-Accelerated Monte Carlo Simulation Code“, Med. Phys., 38 (6), 3411–3411, 2011.
 - [50] S. HISSOINY, B. OZELL, H. BOUCHARD, P. DESPRÉS: „GPUMCD: A new GPU-oriented Monte Carlo dose calculation platform“, Med. Phys., 38 (2), 754–764, 2011.
 - [51] X. JIA, X. GU, Y.J. GRAVES, M. FOLKERTS, S.B. JIANG: „GPU-based fast Monte Carlo simulation for radiotherapy dose calculation“, Phys. Med. Biol., 56 (22), 7017, 2011.

-
- [52] L. SU, Y. YANG, B. BEDNARZ, E. STERPIN, X. DU, T. LIU, W. JI, X.G. XU: „ARCHERRT – A GPU-based and photon-electron coupled Monte Carlo dose computing engine for radiation therapy: Software development and application to helical tomotherapy“, *Med. Phys.*, 41 (7), 071709, 2014.
- [53] A. BADAL, A. BADANO: „Accelerating Monte Carlo simulations of photon transport in a voxelized geometry using a massively parallel graphics processing unit“, *Med. Phys.*, 36 (11), 4878–4880, 2009.
- [54] G.J. LEBEAU: „A parallel implementation of the direct simulation Monte Carlo method“, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 174 (3–4), 319–337, 1999.
- [55] S. DIETRICH, I.D. BOYD: „Scalar and Parallel Optimized Implementation of the Direct Simulation Monte Carlo Method“, *J. Comput. Phys.*, 126 (2), 328–342, 1996.
- [56] DENISE B. PELOWITZ, HRSG.: „MCNP6 User’s Manual, Version 1.0“. Los Alamos National Laboratory, 2013.
- [57] G.A. WRIGHT, E. SHUTTLEWORTH, M.J. GRIMSTONE, A.J. BIRD: „The status of the general radiation transport code MCBEND“, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. Mater. At.*, 213, 162–166, 2004.
- [58] G. COLLABORATION: „Geant4 User’s Guide for Application Developers“, 9, 2012.
- [59] D. GABLER, J. HENNIGER, U. REICHEL: „AMOS – An effective tool for adjoint Monte Carlo photon transport“, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. Mater. At.*, 251 (2), 326–332, 2006.
- [60] J. HENNIGER: „Grundlagen der Abschirmberechnungen mit Monte-Carlo-Methoden“, *Wiss. Z. Tech. Univ. Dresd.*, 39 (3), 9–16, 1990.
- [61] D. BROGGIO, J. BENTO, M. CALDEIRA, E. CARDENAS-MENDEZ, J. FARAH, T. FONSECA, C. KONVALINKA, L. LIU, B. PEREZ, K. CAPELLO, P. COWAN, J.-A. CRUZATE, L. FREIRE, J.-M. GÓMEZ-ROS, S. GOSSIO, B. HEIDE, J. HUIKARI, J. HUNT, S. KINASE, G.H. KRAMER, O. KURIHARA, A. KYRIELEIS, A.-L. LEBACQ, D. LEONE, C. LI, J. LI, L.-C. MIHAILESCU, M. MORALEDA, J.-F. NAVARRO, C. OLIVEIRA, N. PUERTA, U. REICHEL, C. SIMÕES, D. SOMMER, M. TAKAHASHI, P. TELES, F. VANHAVERE, T. VRBA, D. FRANCK, G. GUALDRINI, M.-A. LOPEZ: „Monte Carlo modelling for the in vivo lung monitoring of enriched uranium: Results of an international comparison“, *Radiat. Meas.*, 47 (7), 492–500, 2012.
- [62] U. KRIESTEN: „Erweiterung des Strahlungstransportprogramms AMOS zur Berechnung von Strahlungsfeldern hochenergetischer Elektronen mit Energien bis 40 MeV“, Diplomarbeit, Technische Universität Dresden, 2008.
- [63] C. KONVALINKA: „Erweiterung des Strahlungstransportprogramms AMOS zur Berechnung von Strahlungsfeldern um varianzreduzierende Methoden“, Diplomarbeit. TU Dresden, Fachrichtung Physik, 2011.
- [64] U. REICHEL, D. SOMMER, J. HENNIGER: „Handling of high resolution imaging data for usage in Monte Carlo calculations“, 2014.
- [65] D. SOMMER, U. REICHEL, M. SOMMER, J. HENNIGER: „Forward and adjoint Monte Carlo simulations for sensitivity studies in difficult geometries“, 2014.

-
- [66] M.B. EMMETT, S.K. FRALEY, S.A. DUPREE, R.E. LIDTHILL: „Rsic Computer Code Collection: MORSE-SGC A Super Grouped Coross Section Version of the MORSE Code“. Oak Ridge, Tennessee: Oak Ridge National Laboratory, 1983.
 - [67] F.S. GAVALDA, J.M.F. VAREA, J.S. ROMA, O. DE C. I D. ECONÒMIC: „PENELOPE 2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport : Workshop Proceedings, Barcelona, Spain 30 June-3 July 2008“. OECD, 2009.
 - [68] E. BRUN, F. DAMIAN, C.M. DIOP, E. DUMONTEIL, F.X. HUGOT, C. JOUANNE, Y.K. LEE, F. MALVAGI, A. MAZZOLO, O. PETIT: „Tripoli-4[®], CEA, EDF and AREVA reference Monte Carlo code“, *Ann. Nucl. Energy*, 82, 151–160, 2015.
 - [69] D.E. CULLEN: „Users Manual for TART 2002: A Coupled Neutron-Photon 3-D, Combinatorial Geometry Time Dependent Monte Carlo Transport Code“, Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL), Livermore, CA, 2003.
 - [70] A. FERRARI: „Fluka: A Multi-particle Transport Code : (program Version 2005)“. CERN, 2005.
 - [71] R.L. FORD, W.R. NELSON: „The EGS code system: computer programs for the Monte Carlo simulation of electromagnetic cascade showers (Version 3)“, SLAC National Accelerator Laboratory (SLAC), 2006.
 - [72] J.E. HOOGENBOOM: „Monte Carlo zero-variance schemes: Theory, demonstration and practical consequences“, *Proc. MC2003 Gatlinburg* April, 6–11, 2003.
 - [73] J.E. HOOGENBOOM, D. LÉGRÁDY: „A critical review of the weight window generator in MCNP“, *Am. Nucl. Soc.*, 17–21, 2005.
 - [74] K.W. BURN: „Optimizing Monte Carlo To Multiple Responses: the Direct Statistical Approach, 10 Years On“, *Nucl. Technol.*, 175 (1), 138–145, 2011.
 - [75] J. SWEEZY, F. BROWN, T. BOOTH, J. CHIARAMONTE, B. PREEG: „Automated variance reduction for MCNP using deterministic methods“, *Radiat. Prot. Dosimetry*, 116 (1–4), 508–512, 2005.
 - [76] E.M.A. HUSSEIN: „Radiation Mechanics: Principles & Practice“. Elsevier, 2010.
 - [77] J.C. WAGNER, A. HAGHIGHAT: „Automated variance reduction of Monte Carlo shielding calculations using the discrete ordinates adjoint function“, *Nucl. Sci. Eng.*, 128 (2), 186–208, 1998.
 - [78] K.A. VAN RIPER, T.J. URBATSCH, P.D. SORAN: „AVATAR - Automatic variance reduction in Monte Carlo calculations“, *Jt. Int. Conf. Math. Methods Supercomput. Nucl. Appl. Saratoga Springs NY U. S.* 6-10 Oct 1997, 1, 661–671, 1997.
 - [79] T.E. BOOTH: „Automatic Importance Estimation in Forward Monte Carlo Calculations“, *Trans Am Nucl Soc U. S.*, 41, 1982.
 - [80] J.S. HENDRICKS: „A Code-Generated Monte Carlo Importance Function“, *Trans Am Nucl Soc U. S.*, 41, 1982.
 - [81] J.J. DUDERSTADT, W.R. MARTIN: „Transport Theory“. Wiley, 1979.
 - [82] DEUTSCHE NORM: „DIN 6812-2: Begriffe in der radiologischen Technik, Teil 2: Strahlungsphysik“. Deutsches Institut für Normung e. V., 2000.
 - [83] D.J. THOMAS: „ICRU report 85: fundamental quantities and units for ionizing radiation“. Oxford University Press, 2012.

- [84] B. DÖRSCHEL, V. SCHURICHT, J. STEUER: „Praktische Strahlenschutzphysik“. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 1992.
- [85] F.H. ATTIX, W.C. ROESCH, E. TOCHILIN: „Radiation Dosimetry I Fundamentals“, Second Edition. Academic Press, 1968.
- [86] W. STOLZ: „Radioaktivität: Grundlagen - Messung - Anwendungen“. Wiesbaden: Teubner, 2005.
- [87] H. KIESEWETTER: „Elementare Methoden der numerischen Mathematik“. Wien; New York: Springer, 2013.
- [88] G.J. GBUR: „Mathematical Methods for Optical Physics and Engineering“. Cambridge; New York: Cambridge University Press, 2011.
- [89] W. HENGARTNER, R. THEODORESCU: „Einführung in die Monte - Carlo - Methode“. München; Wien: Hanser Fachbuchverlag, 1989.
- [90] B. LAPEYRE, E. PARDOUX, R. SENTIS: „Introduction to Monte-Carlo Methods for Transport and Diffusion Equations“. Oxford: Oxford Univ Pr, 2003.
- [91] W. HASTINGS: „Monte-Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications“, *Biometrika*, 57 (1), 97-, 1970.
- [92] N. METROPOLIS, A. ROSENBLUTH, M. ROSENBLUTH, A. TELLER, E. TELLER: „Equation of State Calculations by Fast Computing Machines“, *J. Chem. Phys.*, 21 (6), 1087–1092, 1953.
- [93] L. PAPULA: „Mathematik für Ingenieure und Naturwissenschaftler Band 3: Vektoranalysis, Wahrscheinlichkeitsrechnung, Mathematische Statistik, Fehler- und Ausgleichsrechnung“, Auflage: 6., Überarb. u. erw. Aufl. 2011. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, 2011.
- [94] D. ISO: „11929–Bestimmung der charakteristischen Grenzen (Erkennungsgrenze, Nachweisgrenze und Grenzen des Vertrauensbereichs) bei Messungen ionisierender Strahlung–Grundlagen und Anwendungen (ISO 11929: 2010)“, Dtsch. Fass., 1, 2011.
- [95] BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP, OIML: „Evaluation of measurement data—supplement 1 to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement”—propagation of distributions using a Monte Carlo method. Joint Committee for Guides in Metrology, JCGM 101: 2008“, Int. Organ. Stand. Geneva, 2008.
- [96] T.E. BOOTH, H.G. HUGHES, A. ZUKAITIS, F.B. BROWN, R.D. MOSTELLER, M. BOGGS, J.S. BULL, R.E. PRAEL, R. MARTZ, R.A. FORSTER, A. SOOD, J.T. GOORLEY, J.E. SWEEZY: „MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory“. Los Alamos National Laboratory, 2003.
- [97] I.M. SOBOLOV: „Die Monte-Carlo-Methode“. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaft, 1971.
- [98] G. MUSIOL: „Taschenbuch der Mathematik“. Deutsch, 2008.
- [99] W.J. THOMPSON: „Computing for Scientists and Engineers“. Wiley, 1992.
- [100] G.F. KNOLL: „Radiation Detection and Measurement“. John Wiley & Sons, 2010.
- [101] J. SPANIER, E.M. GELBARD: „Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems“. Addison-Wesley, 1969.

-
- [102] D.P. KROESE, T. TAIMRE, Z.I. BOTEV: „Handbook of Monte Carlo Methods“. John Wiley & Sons, 2013.
- [103] F. BROWN: „Fundamentals of Monte Carlo Particle Transport, Lecture notes for Monte Carlo course“, Los Alamos National Lab., NM (USA), LA-UR-05-4983, 2005.
- [104] M. GOLDSTEIN, E. GREENSPAN: „A Recursive Monte-carlo Method For Estimating Importance Function Distributions In Deep-penetration Problems“, Nucl. Sci. Eng., 76 (3), 308–322, 1980.
- [105] I. MURATA, D. FILGES, F. GOLDENBAUM: „A new approach to estimate importance for weight window in forward Monte Carlo calculations“, Nucl. Sci. Eng., 159 (3), 273–283, 2008.
- [106] J.M. HAMMERSLEY, D.C. HANDSCOMB: „Monte Carlo Methods“. Methuen, 1964.
- [107] G. FISHMAN: „Monte Carlo“. Springer Science & Business Media, 1996.
- [108] LOS ALAMOS MONTE CARLO GROUP: „MCNP: A General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport“. Los Alamos National Laboratory, 1981.
- [109] R.R. COVEYOU, V.R. CAIN, K.J. YOST: „Adjoint and Importance In Monte Carlo Application“, Nucl. Sci. Eng., 27 (2), 219–234, 1967.
- [110] H. KAHN: „Estimation of particle transmission by random sampling“, Natl. Bur. Stand. Appl. Math. Ser., 12, 1951.
- [111] W.L. DUNN, J.K. SHULTIS: „Exploring Monte Carlo Methods“. Elsevier, 2011.
- [112] D. GABLER: „Implementierung des adjungierten Teilchentransports in nichtanaloge Monte-Carlo-Algorithmen“. Diplomarbeit, TU Dresden, 2005.
- [113] D. IRVING: „Adjoint Boltzmann Equation and Its Simulation by Monte-Carlo“, Nucl. Eng. Des., 15 (3), 273–, 1971.
- [114] A. DUBI, T. ELPERIN, D.J. DUDZIAK: „Geometrical Splitting In Monte-Carlo“, Nucl. Sci. Eng., 80 (1), 139–161, 1982.
- [115] T.E. BOOTH: „Pulse Height Tally Variance Reduction in MCNP“, Los Alamos Natl. Lab. Rep., (LA-13955), 2004.
- [116] A. THOMPSON, D. ATTWOOD, E. GULLIKSON, M. HOWELLS, K.J. KIM, J. KIRZ, J. KORTRIGHT, I. LINDAU, P. PIANATTA, A. ROBINSON: „X-RAY DATA BOOKLET“, Lawrence Berkeley Natl. Lab., LBNL/PUB-490 Rev. 2, 2001.
- [117] M. J. BERGER, J. H. HUBBELL, S. M. SELTZER, J. CHANG, J. S. COURSEY, R. SUKUMAR, D. S. ZUCKER, K. OLSEN: „XCOM: Photon Cross Sections Database“, NIST Stand. Ref. Database, 8, 2010.
- [118] T.E. BOOTH, R.A. FORSTER, R.L. MARTZ: „MCNP Variance Reduction Developments in the 21st Century“, Nucl. Technol., 180 (3), 355–371, 2012.
- [119] A.J. VAN WIJK, G. VAN DEN EYNDE, J.E. HOOGENBOORN: „An easy to implement global variance reduction procedure for MCNP“, Ann. Nucl. Energy, 38 (11), 2496–2503, 2011.
- [120] W.A. COLEMAN: „Mathematical Verification of A Certain Monte Carlo Sampling Technique and Applications of Technique To Radiation Transport Problems“, Nucl. Sci. Eng., 32 (1), 76–, 1968.
- [121] T.E. BOOTH: „A Sample Problem for Variance Reduction in MCNP“, Los Alamos National Lab., NM (USA), LA-10363-MS, 1985.

- [122] E. BROWNE, J.K. TULI: „Nuclear data sheets for A = 137“, Nucl. Data Sheets, 108 (10), 2173, 2007.
- [123] D.E. CULLEN, J.H. HUBBELL, L. KISSEL: „EPDL97: the evaluated photon data library,'97 version“, UCRL-50400, 6 (5), 1–28, 1997.
- [124] B. DÖRSCHEL, V. SCHURICHT, J. STEUER: „Praktische Strahlenschutzphysik“. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 1992.
- [125] S.T. PERKINS, D.E. CULLEN, M.H. CHEN, J. RATHKOPF, J. SCOFIELD, J.H. HUBBELL: „Tables and graphs of atomic subshell and relaxation data derived from the LLNL Evaluated Atomic Data Library (EADL), Z= 1–100“, Lawrence Livermore National Lab., CA (United States), 1991.
- [126] DIETER MESCHKE: „Gerthsen Physik“. Springer-Verlag, 2015.
- [127] M. SOMMER, A. JAHN, J. HENNIGER: „Beryllium oxide as optically stimulated luminescence dosimeter“, Radiat. Meas., 43 (2), 353–356, 2008.
- [128] A. JAHN, M. SOMMER, J. HENNIGER: „2D-OSL-dosimetry with beryllium oxide“, Radiat. Meas., 45 (3), 674–676, 2010.
- [129] M. SOMMER, A. JAHN, J. HENNIGER: „A new personal dosimetry system for H P (10) and H P (0.07) photon dose based on OSL-dosimetry of beryllium oxide“, Radiat. Meas., 46 (12), 1818–1821, 2011.
- [130] A. JAHN: „Experimentelle und rechnerische Bestimmung des Energieansprechvermögens und der Nachweiseffizienz für BeO-OSL-Detektoren“, Dissertation, TU Dresden, 2013.
- [131] A. JAHN, M. SOMMER, W. ULLRICH, M. WICKERT, J. HENNIGER: „The BeOmax system–dosimetry using OSL of BeO for several applications“, Radiat. Meas., 56, 324–327, 2013.
- [132] D. SOMMER, M. SOMMER, U. REICHEL, A. JAHN, J. HENNIGER, R. PRAETORIUS: „MM-scale high dose measurement with BeOmax“.
- [133] M. SOMMER, A. JAHN, D. SOMMER, J. HENNIGER, D. GEHRE: „The dosimetry system BeOmax in technical applications“.
- [134] M. SOMMER, A. JAHN, R.M. PRAETORIUS, D. SOMMER, J. HENNIGER: „A mm-Scale Dosimetry System Based on Optically Stimulated Luminescence of Beryllium Oxide for Investigation of Dose Rate Profiles in Constricted Environments-12219“, 2012.
- [135] A. JAHN, M. SOMMER, J. HENNIGER: „OSL efficiency for BeO OSL dosimeters“, Radiat. Meas., 71, 104–107, 2014.
- [136] A. JAHN, M. SOMMER, J. HENNIGER: „Environmental dosimetry with the BeOSL personal dosimeter–State of the Art“, Radiat. Meas., 71, 438–441, 2014.
- [137] A. JAHN, M. SOMMER, J. HENNIGER: „Environmental dosimetry with the BeOSL personal dosimeter“, Radiat. Prot. Dosimetry, 170 (1–4), 346–349, 2016.
- [138] T. HANINGER, H. HÖDLMOSE, M. FIGEL, D. KÖNIG-MEIER, J. HENNIGER, M. SOMMER, A. JAHN, G. LEDTERMANN, R. EBER: „Properties of the BeOSL dosimetry system in the framework of a large-scale personal monitoring service“, Radiat. Prot. Dosimetry, ncv425, 2015.
- [139] E. MENDE: „BeOSL system for personal dosimetry: dosimetric characteristics and practical application“, 2015.

-
- [140] PHYSIKALISCH-TECHNISCHE BUNDESANSTALT: „Ortsdosimeter zur Messung der Umgebungs- und Richtungs-Äquivalentdosis und der Umgebungs- und Richtungs-Äquivalentdosisleistung, PTB-A 23.3“. 2007.
- [141] PHYSIKALISCH-TECHNISCHE BUNDESANSTALT: „Strahlenschutzmessgeräte Personendosimeter zur Messung der Tiefen- und Oberflächen-Personendosis, PTB-A 23.2“. 2005.
- [142] INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION: „X and Gamma Reference Radiations for Calibrating Dosemeters and Doserate Meters and for Determining Their Response as a Function of Photon Energy“. ISO 4037-1, 1996.
- [143] U. ANKERHOLD: „Catalogue of x-ray spectra and their characteristic data-ISO and DIN radiation qualities, therapy and diagnostic radiation qualities, unfiltered x-ray spectra“, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, 2000.
- [144] J.H. HUBBELL, W.J. VEIGELE, E.A. BRIGGS, R.T. BROWN, D.T. CROMER, R.J. HOWERTON: „Atomic form factors, incoherent scattering functions, and photon scattering cross sections“, J. Phys. Chem. Ref. Data, 4 (3), 471–538, 1975.

Anhang A: Monte Carlo Methoden im Strahlungstransport

Inhalt

1	Lösung von Integrationsaufgaben mit Monte Carlo Methoden	2
2	Anwendung auf die Strahlungstransporttheorie	3
3	Berechnung von Teilchenlebensgeschichten	12
4	Analoge und nicht-analoge Monte Carlo Methoden	15
5	Literatur	19

1 Lösung von Integrationsaufgaben mit Monte Carlo Methoden

Um ein gegebenes Integral

$$I = \int_a^b h(x)f(x) dx \quad (1)$$

mit Hilfe von Monte Carlo Methoden zu berechnen, muss die Problemstellung zunächst in die Berechnung eines Erwartungswertes umformuliert werden [1]. Die Funktionen $h(x)$ und $f(x)$ seien im Intervall $[a, b]$ positiv und beschränkt mit $a, b, x \in \mathbb{R}^n$. In der Maßtheorie wird der Erwartungswert allgemein über

$$\mathbb{E}(X) = \int_E dP(\omega) X(\omega) \quad (2)$$

definiert. $\mathbb{E}(X)$ existiert und ist endlich, wenn X integrierbar ist. Die Menge Ω gehört zum Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{A}, P) , mit der Sigma-Algebra \mathcal{A} über die Grundmenge Ω . P ist ein Wahrscheinlichkeitsmaß und als $P: \mathcal{A} \rightarrow [0,1]$ mit $P(E) = 1$ definiert. Eine ausführliche Einführung in die Maßtheorie ist zum Beispiel in [2] gegeben.

Für in dieser Arbeit betrachtete reelle Zufallsvariablen gilt $X: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$. Der Bildraum ist hierbei $(\mathbb{R}^n, \mathcal{B}, P_X)$, mit der borelschen Sigma-Algebra $\mathcal{B} = \mathcal{B}(\mathbb{R}^n)$. Das Bildmaß $P_X = P_X(x) = P(X^{-1}(x))$ für $x \in \mathbb{R}^n$ ist die Verteilung von X . Für eine messbare Funktion $g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ gilt nach der Substitutionsregel [2]

$$\mathbb{E}(g(X)) = \int_{\mathbb{R}} dP_X(x) g(x). \quad (3)$$

Wird nun für die Verteilung

$$dP_X(x) = dx \frac{1}{\eta} \cdot f(x) \quad (4)$$

mit dem Normierungsfaktor

$$\eta = \int_a^b dx f(x) \quad (5)$$

angenommen, so ergibt sich Gleichung (3) zu

$$\mathbb{E}(g(X)) = \mathbb{E}(h(X) \cdot \eta) = \int_a^b dx h(x) f(x) = I, \quad (6)$$

wenn $g(X) = h(X) \cdot \eta$ eingesetzt wird. Gilt $\eta = 1$, so ist $f(x)$ eine Dichtefunktion. Andernfalls ist $\eta^{-1} \cdot f(x)$ die Dichtefunktion zur Verteilung von X . Um einen erwartungstreuen Schätzer für I aus Gleichung (1) mittels Monte Carlo Methode zu erhalten, muss demnach

$$\tilde{I} = \tilde{I}(X_1, \dots, X_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta \cdot h(X_i) \quad (7)$$

mit Hilfe einer Stichprobe X_1, \dots, X_N vom Umfang N berechnet werden. Die Zufallsvariablen sind hierbei nach P_X verteilt. Das zweite Moment wird über

$$\tilde{I}^2 = \tilde{I}^2(X_1, \dots, X_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta^2 \cdot h(X_i)^2 \quad (8)$$

berechnet. Die Standardunsicherheit des Mittelwerts \tilde{I} ergibt nach [3] sich zu

$$\Delta \tilde{I} = \Delta \tilde{I}(X_1, \dots, X_N) = \sqrt{\frac{1}{N-1} (\tilde{I}^2 - \tilde{I}^2)} . \quad (9)$$

2 Anwendung auf die Strahlungstransporttheorie

Die Lösung eines Strahlungstransportproblems mit Monte Carlo Methoden basiert auf der Berechnung des interessierenden Effekts I ,

$$I = \iiint_{\Delta \Omega} \int_{\Delta E} \int_{\Delta t} \int_{\Delta V} dV dt dE d\Omega f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) \zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) , \quad (10)$$

im interessierenden Gebiet $\Delta \Omega \times \Delta E \times \Delta t \times \Delta V$ [4]. Im Folgenden wird ein stationäres Problem angenommen. Alle Größen sind zeitunabhängig und die Integration über die Zeit entfällt. Ist ein nichtstationäres Problem gegeben, so kann dieses durch Transformation in ein stationäres überführt werden [5]. Wird $\Delta \Gamma = \Delta \Omega \times \Delta E \times \Delta t \times \Delta V \equiv [q, q + \Delta q]$ mit $q = (\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \in \Gamma$ eingesetzt, so ergibt sich die Kurzdarstellung

$$I = \int_{\Delta \Gamma} dq f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) \zeta_{E\Omega}(q) . \quad (11)$$

Zur Herleitung einer allgemeinen Lösungsvorschrift wird zunächst die Integration über den ganzen Phasenraum Γ betrachtet,

$$J = \int_{\Gamma} dq g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) \zeta_{E\Omega}(q) . \quad (12)$$

Hierbei ist

$$g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) = \begin{cases} f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q), & q \in \Delta\Gamma \\ 0, & q \notin \Delta\Gamma \end{cases} . \quad (13)$$

Für Stoßteilchendichte $\zeta_{E\Omega}(q)$ ergibt als Lösung der integralen Strahlungstransportgleichung die LI-OUVILLE-NEUMANN-Reihe [4, 6],

$$\zeta_{E\Omega}(q) = \sum_{i=0}^{\infty} \zeta_{E\Omega}^i(q) \quad (14)$$

mit

$$\zeta_{E\Omega}^i(q) = \mathcal{T} \cdot \mathcal{C} \cdot \zeta_{E\Omega}^{i-1}(q') \quad (15)$$

und

$$\zeta_{E\Omega}^0(q) = s_{E\Omega}^{\mathcal{T}}(q) . \quad (16)$$

Die transformierte Quelldichte $s_{E\Omega}^{\mathcal{T}}$ steht hierbei kurz für

$$s_{E\Omega}^{\mathcal{T}}(q) = s_{E\Omega}^{\mathcal{T}}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \mathcal{T}(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot s_{E\Omega}(\vec{r}', t', E, \vec{\Omega}) . \quad (17)$$

Mit $\zeta_{E\Omega}^i$ wird die Stoßteilchendichte der Teilchen, welche in die $(i + 1)$ -te Streuordnung eintreten, beschrieben [4]. Daher kann (35) als die Zerlegung der Lösung $\zeta_{E\Omega}(q)$ in Streuordnungen interpretiert werden.

Die Summation in (14) kann nicht bis ∞ erfolgen und muss folglich bei einem Index n abgebrochen werden. Dies bedeutet,

$$\zeta_{E\Omega}(q) = \sum_{i=0}^n \zeta_{E\Omega}^i(q) \quad (18)$$

gilt hinreichend genau und $\zeta_{E\Omega}^j(q) > \zeta_{E\Omega}^{j+1}(q)$ ab einem bestimmten Index $j > 0$. Dies ist bei allen typischen Problemstellungen der Fall. Spezielle Probleme, wie zum Beispiel Kritikalitätsberechnungen in der Reaktorphysik, bedürfen anderer Ansätze [4, 7]. In das Ausgangsintegral (12) eingesetzt ergibt sich

$$J = \sum_{i=0}^n \int_{\Gamma} dq g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) \zeta_{E\Omega}^i(q) \equiv \sum_{i=0}^n J_i. \quad (19)$$

Jedes Integral J_i kann nun mit Monte Carlo Methoden gelöst werden. Dazu muss J_i zunächst ausgeschrieben werden. Mit (15) ergibt sich

$$J_i = \int_{\Gamma} dq \, g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) \prod_{j=1}^i (\mathcal{T} \cdot \mathcal{C}) \cdot s_{E\Omega}^{\mathcal{T}}(q'). \quad (20)$$

Die Operatoren \mathcal{T} und \mathcal{C} sind über

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_V dV' \, \tau(\vec{r}, \vec{r}', E, \vec{\Omega}) \quad (21)$$

und

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}(\vec{r}', E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \iint_{4\pi} \int_0^\infty d\Omega' dE' \, c(\vec{r}', E, E', \vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \quad (22)$$

mit

$$\tau(\vec{r}, \vec{r}', E, \vec{\Omega}) = \Sigma_t(\vec{r}, E) e^{-\int_{(\vec{r}' \rightarrow \vec{r})} \Sigma_t(r, E) dr} \cdot \delta(\vec{r} - \vec{\Omega} \cdot |\vec{r} - \vec{r}'|) \quad (23)$$

und

$$c(\vec{r}', E, E', \vec{\Omega}, \vec{\Omega}') = \sum_{j,k} \frac{Y_{j,k}(E')}{\Sigma_t(\vec{r}', E')} \cdot \frac{d^2 \Sigma_S^{j,k}}{dE d\Omega}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \quad (24)$$

definiert [4]. Die Größe $d^2 \Sigma_S^{j,k} / dE d\Omega$ ist die doppelt-differentielle Wirkungsquerschnittsdichte für eine Streureaktion vom Typ j am Nuklid k , wobei sich die Teilchenenergie von E' in E und die Richtung von $\vec{\Omega}'$ in $\vec{\Omega}$ ändert. $Y_{j,k}$ ist die Ausbeute, die mittlere Anzahl entstehender Teilchen.

Für das Operatorprodukt $\mathcal{T} \cdot \mathcal{C}$ in (20) gilt

$$\mathcal{T} \cdot \mathcal{C} = \int_V \iint_{4\pi} \int_0^\infty dV' d\Omega' dE' \, \tau(\vec{r}, \vec{r}', E, \vec{\Omega}) c(\vec{r}', E, E', \vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \equiv \int_{\Gamma} dq' \, k(q, q'). \quad (25)$$

Mit der so eingeführten Funktion $k(q, q')$ wird (20) zu

$$\begin{aligned}
I_i &= \int_{\Gamma} dq_i g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q_i) \int_{\Gamma} dq_{i-1} k(q_i, q_{i-1}) \zeta_{E\Omega}^{i-1}(q_{i-1}) \\
&= \int_{\Gamma} dq_i g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q_i) \int_{\Gamma} dq_{i-1} k(q_i, q_{i-1}) \int_{\Gamma} dq_{i-2} k(q_{i-1}, q_{i-2}) \dots \\
&\quad \dots \int_{\Gamma} dq_1 k(q_2, q_1) \int_{\Gamma} dq_0 k(q_1, q_0) s_{E\Omega}^T(q_0).
\end{aligned} \tag{26}$$

Auf diese Darstellung wird nun die Lösung mit Monte Carlo Methoden angewendet. Der Ansatz, $\zeta_{E\Omega}^i(q_i)$ durch Normierung in einer Dichtefunktion zu transformieren, würde die Berechnung aller Integrale rechts von $g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q_i)$ erfordern. Eine andere Möglichkeit ist, beim letzten Integral zu beginnen und entweder die Funktion $k(q_1, q_0)$ oder die transformierte Quelldichte $s_{E\Omega}^T(q_0)$ zu einer Dichte zu skalieren. Da die Quelldichte $s_{E\Omega}$ der fixen Quellen als Teil von $s_{E\Omega}^T$ durch die Problemstellung gegeben ist, wäre die Normierung von $s_{E\Omega}^T$ vorzuziehen.

Für das q_1 -Integral ist das q_0 -Integral wiederum eine Funktion, welche als Dichtefunktion interpretiert werden kann. Die Normierung dieser Funktion ist jedoch analytisch nicht möglich, sodass diese zuerst ausreichend genau durch Monte Carlo Methoden berechnet werden muss. Demnach wäre die Normierung von $k(q_2, q_1)$ vorzuziehen. Stichproben bezüglich der Verteilung von $k(q_2, q_1)$ würden sich dann auf q_1 beziehen und wären in das q_0 -Integral einzusetzen. Auch in diesem Fall müsste dieses Integral erst ausreichend genau durch Monte Carlo Methoden berechnet werden. Außerdem bedeutet das Erzeugen von Stichproben für q_1 mit gegebenem Wert für q_2 physikalisch, dass Eingangsgrößen q_1 vor einer Wechselwirkung bestimmt werden. Diese basieren hierbei auf Eingangsgrößen q_2 vor der als nächstes stattfindenden Wechselwirkung. Dieses Vorgehen wäre dadurch entgegen der Zeitrichtung.

Der zielführende Ansatz folgt aus diesem Grund aus der Beachtung der physikalisch vorgegebenen Zeitrichtung. Es sollen Stichproben für Eingangsgrößen q_i basierend auf q_{i-1} erzeugt werden. Diese Vorschrift folgt, wenn in (26) die Integration über $g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q_i)$ unter das q_{i-1} -Integral gezogen wird,

$$\begin{aligned}
I_i &= \int_{\Gamma} dq_{i-1} \left[\int_{\Gamma} dq_i g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q_i) k(q_i, q_{i-1}) \right] \int_{\Gamma} dq_{i-2} k(q_{i-1}, q_{i-2}) \dots \\
&\quad \dots \int_{\Gamma} dq_1 k(q_2, q_1) \int_{\Gamma} dq_0 k(q_1, q_0) s_{E\Omega}^T(q_0).
\end{aligned} \tag{27}$$

Das Integral in eckigen Klammern,

$$K_i(q_{i-1}) = \int_{\Gamma} dq_i g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q_i) k(q_i, q_{i-1}), \quad (28)$$

kann nun mit Monte Carlo Methoden gelöst werden. Dazu wird $k(q_i, q_{i-1})$ durch das Einfügen eines Faktors η_i normiert und als Dichte der Verteilung

$$dP_{Q^i}(q_i) = dq_i \frac{k(q_i, q_{i-1})}{\eta_i(q_{i-1})} \quad (29)$$

bezüglich einer Zufallsvariable $Q^i: \Omega^i \rightarrow \mathbb{R}^n$ im abstrakten Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega^i, \mathcal{A}^i, P^i)$ mit Bildraum $(\mathbb{R}^n, \mathcal{B}, P_{Q^i})$ interpretiert. Um $\eta_i(q_{i-1})$ zu berechnen, muss das Integral

$$\eta_i(q_{i-1}) = \int_{\Gamma} dq_i k(q_i, q_{i-1}) \quad (30)$$

gelöst werden. Nach Gleichung (25) wird η_i zu

$$\eta_i(q_{i-1}) = \iint_{4\pi} \int_0^\infty d\Omega_i dE_i c(\vec{r}_{i-1}, E_i, E_{i-1}, \vec{\Omega}_i, \vec{\Omega}_{i-1}) \int_V dV_i \tau(\vec{r}_i, \vec{r}_{i-1}, E_i, \vec{\Omega}_i). \quad (31)$$

Zunächst wird das Integral über den Integralkern τ des Transportintegraloperators berechnet,

$$\tau_V = \int_V dV_i \tau(\vec{r}_i, \vec{r}_{i-1}, E_i, \vec{\Omega}_i). \quad (32)$$

Mit Gleichung (23),

$$\tau(\vec{r}_i, \vec{r}_{i-1}, E_i, \vec{\Omega}_i) = \Sigma_t(\vec{r}_i, E_i) e^{-\int_{\vec{r}_{i-1} \rightarrow \vec{r}_i} \Sigma_t(r, E_i) dr} \cdot \delta(\vec{r}_i - \vec{\Omega}_i \cdot |\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1}|), \quad (33)$$

ist eine allgemeine Darstellung des Integralkerns gegeben. Durch spezielle Variablentransformation wird (32) zu [4]

$$\begin{aligned} \tau_V &= \int_0^\infty dR \Sigma_t(\vec{r}_{i-1} + R \cdot \vec{\Omega}_i, E_i) e^{-\int_0^R \Sigma_t(\vec{r}_{i-1} + R' \cdot \vec{\Omega}_i, E_i) dR'} \\ &= - \int_0^\infty dR \frac{d}{dR} e^{-\int_0^R \Sigma_t(\vec{r}_{i-1} + R' \cdot \vec{\Omega}_i, E_i) dR'} = 1 - e^{-\int_0^\infty \Sigma_t(\vec{r}_{i-1} + R' \cdot \vec{\Omega}_i, E_i) dR'} = 1. \end{aligned} \quad (34)$$

$\tau_V = 1$ gilt, sofern der gesamte Phasenraum mit Materialien gefüllt ist, für die $\Sigma_t(\vec{r}, E) > 0$ gilt. Dies bedeutet, dass jedes Teilchen, welches sich am Ort \vec{r}_{i-1} mit der Energie E_i in Richtung $\vec{\Omega}_i$ bewegt, mit der Wahrscheinlichkeit von 1 irgendwo im Phasenraum einer Wechselwirkung unterliegt.

Diese Bedingung wird auch erfüllt, wenn das interessierende Gebiet $\Delta\Gamma \subseteq \Gamma_g$ als Teil einer gegebenen endlichen Geometrie $\Gamma_g \subset \Gamma$ betrachtet wird, welche von einem hypothetischen unendlich ausgedehnten vollständigen Absorber $\Gamma_a \subset \Gamma$ mit $\Gamma_g \cup \Gamma_a = \Gamma$ umgeben ist [8]. Für den Absorber gilt $\Sigma_a(q) = \Sigma_t(\vec{r}, E) > 0$ für alle $q \in \Gamma_a$. Die einzige Wechselwirkung ist demnach Absorption, unabhängig von der Teilchenart. Da der Phasenraum Γ die Zeit und der Energie enthält, kann sich ein solcher Absorber auch auf untere und obere Grenzenenergien oder für nicht-stationäre Probleme auf obere Zeitgrenzen beziehen. Im Folgenden sei die Existenz eines solchen Absorbers erfüllt.

Für die Integraldarstellung aus Gleichung (31) bleibt für den Normierungsfaktor $\eta_i(q_{i-1})$ noch

$$\begin{aligned} \eta_i(q_{i-1}) &= \iint \int_{4\pi}^{\infty} d\Omega_i dE_i c(\vec{r}_{i-1}, E_i, E_{i-1}, \vec{\Omega}_i, \vec{\Omega}_{i-1}) \\ &= \frac{1}{\Sigma_t(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})} \sum_{j,k} Y_{j,k}(E_{i-1}) \Sigma_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1}), \end{aligned} \quad (35)$$

zu lösen, wobei Gleichung (24) eingesetzt wurde. Der Normierungsfaktor beinhaltet die totale Wirkungsquerschnittsdichte Σ_t , die Wirkungsquerschnittsdichte $\Sigma_S^{j,k}$ für Streuung vom Typ j am Nuklid k und die Ausbeute $Y_{j,k}$ der Streureaktion.

Mit Hilfe des Normierungsfaktors wird das mit Monte Carlo Methoden zu lösende Integral (28) zu

$$K_i(q_{i-1}) = \int_{\Gamma} dq_i g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(q_i) \eta_i(q_{i-1}) \left(\frac{k(q_i, q_{i-1})}{\eta_i(q_{i-1})} \right) \quad (36)$$

und kann mittels einer Stichprobe $Q_1^i, \dots, Q_N^i \sim Q^i$ vom Umfang N geschätzt werden, denn

$$\mathbb{E} \left(g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(Q^i) \eta_i(q_{i-1}) \right) = \int_{\Gamma} dP_{Q^i}(q_i) g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(q_i) \eta_i(q_{i-1}) = K_i(q_{i-1}). \quad (37)$$

Die Stichprobe Q_1^i, \dots, Q_N^i ist aber von q_{i-1} abhängig. Bevor diese erhoben werden kann, muss demnach q_{i-1} mittels Monte Carlo Methode ermittelt werden. Aus (27) und (28) folgt zunächst

$$\begin{aligned} I_i &= \int_{\Gamma} dq_{i-1} K_i(q_{i-1}) \int_{\Gamma} dq_{i-2} k(q_{i-1}, q_{i-2}) \int_{\Gamma} dq_{i-3} k(q_{i-2}, q_{i-3}) \dots \\ &\dots \int_{\Gamma} dq_1 k(q_2, q_1) \int_{\Gamma} dq_0 k(q_1, q_0) s_{E\Omega}^T(q_0). \end{aligned} \quad (38)$$

Durch erneutes Vertauschen der Integrationsreihenfolge ergibt sich

$$\begin{aligned}
 J_i = \int_{\Gamma} dq_{i-2} \left[\int_{\Gamma} dq_{i-1} K_i(q_{i-1}) k(q_{i-1}, q_{i-2}) \right] \int_{\Gamma} dq_{i-3} k(q_{i-2}, q_{i-3}) \dots \\
 \dots \int_{\Gamma} dq_1 k(q_2, q_1) \int_{\Gamma} dq_0 k(q_1, q_0) s_{E\Omega}^T(q_0).
 \end{aligned} \tag{39}$$

Das Integral in eckigen Klammern,

$$K_{i-1}(q_{i-2}) = \int_{\Gamma} dq_{i-1} K_i(q_{i-1}) k(q_{i-1}, q_{i-2}), \tag{40}$$

wird nun mit Monte Carlo Methoden gelöst. Dazu wird $k(q_{i-1}, q_{i-2})$ durch das Einfügen des Faktors η_{i-1} normiert und als Dichte der Verteilung

$$dP_{Q^{i-1}}(q) = dq_{i-1} \frac{k(q_{i-1}, q_{i-2})}{\eta_{i-1}(q_{i-2})} \tag{41}$$

bezüglich einer Zufallsvariable $Q^{i-1}: \Omega^{i-1} \rightarrow \mathbb{R}^n$ im abstrakten Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega^{i-1}, \mathcal{A}^{i-1}, P^{i-1})$ mit Bildraum $(\mathbb{R}^n, \mathcal{B}, P_{Q^{i-1}})$ interpretiert.

Mittels einer Stichprobe $Q_1^{i-1}, \dots, Q_N^{i-1} \sim Q^{i-1}$ vom Umfang N kann $K_{i-1}(q_{i-2})$ geschätzt werden, da

$$\mathbb{E} \left(K_i(Q^{i-1}) \eta_{i-1}(q_{i-2}) \right) = \int_{\Gamma} dP_{Q^{i-1}}(q) K_i(q_{i-1}) \eta_{i-1}(q_{i-2}) = K_{i-1}(q_{i-2}). \tag{42}$$

gilt. Auch hier sind $Q_1^{i-1}, \dots, Q_N^{i-1}$ von einem Parameter, q_{i-2} , abhängig. Dieser kann wiederum mit Monte Carlo Methode entsprechend (39) – (42) bestimmt werden. Dies wird solange durchgeführt, bis für das Integral J_i bleibt

$$J_i = \int_{\Gamma} dq_0 K_1(q_0) s_{E\Omega}^T(q_0) \tag{43}$$

mit

$$K_1(q_0) = \int_{\Gamma} dq_1 K_2(q_1) k(q_1, q_0). \tag{44}$$

$K_1(q_0)$ wird mit einer Stichprobe $Q_1^1, \dots, Q_N^1 \sim Q^1$ verteilt nach

$$dP_{Q^1}(q) = dq_1 \frac{k(q_1, q_0)}{\eta_1(q_0)} \tag{45}$$

geschätzt, welche von q_0 abhängt. q_0 wird letztendlich mit einer Monte Carlo Methode bezüglich Gleichung (43) ermittelt. Dazu muss die transformierte Quelldichte $s_{E\Omega}^T$ normiert werden, woraus die Dichtefunktion der Verteilung

$$dP_{Q^0}(q) = dq_0 \frac{s_{E\Omega}^T(q_0)}{\eta_0} \quad (46)$$

entsteht. Für η_0 gilt

$$\begin{aligned} \eta_0 &= \int_{4\pi} \int_0^\infty \int_V \int_V dV' dV dE d\Omega s_{E\Omega}(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) \tau(\vec{r}, \vec{r}', E, \vec{\Omega}) \\ &= \int_{4\pi} \int_0^\infty \int_V dV' dE d\Omega s_{E\Omega}(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) \int_V dV \tau(\vec{r}, \vec{r}', E, \vec{\Omega}). \end{aligned} \quad (47)$$

Das Integral über τ hat nach Gleichung (34) den Wert 1 und es folgt

$$\eta_0 = \int_{4\pi} \int_0^\infty \int_V dV' dE d\Omega s_{E\Omega}(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) = N_{\text{fix}}. \quad (48)$$

η_0 ist demnach die erwartete Anzahl N an Quellemissionen. Es kann auch gefordert werden, dass durch die Problemstellung $N = 1$ vorgegeben wird. Dadurch bezieht sich das zu berechnende Integral J_i auf die Anzahl an Quellemissionen.

Durch das Erheben einer Stichprobe $Q_1^0, \dots, Q_N^0 \sim Q^0$ vom Umfang N für Koordinaten, an denen Teilchen in eine Wechselwirkung eintreten, können jetzt aufeinander aufbauend Stichproben $Q_1^j, \dots, Q_N^j \sim Q^j$ mit der Streuordnung $j = 1, \dots, i$ erzeugt werden. Diese stehen für Koordinaten, an denen Teilchen in die $(j + 1)$ -te Wechselwirkung eintreten. Zu jeder Streuordnung j muss der Normierungsfaktor $\eta_{j+1}(Q^j)$ berechnet werden.

Jede Stichprobe Q_1^j, \dots, Q_N^j dient zum einen zur Berechnung eines erwartungstreuen Schätzers $\tilde{J}_i(Q_1^i, \dots, Q_N^i)$ für J_i nach (20),

$$J_i = \int_\Gamma dq g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) \zeta_{E\Omega}^i(q), \quad (49)$$

und zum anderen als Grundlage zum Erheben der Stichprobe $Q_1^{j+1}, \dots, Q_N^{j+1}$. Der Schätzer $\tilde{J}_i(Q_1^i, \dots, Q_N^i)$ ist schließlich durch

$$\tilde{J}_i = \tilde{J}_i(Q_1^i, \dots, Q_N^i) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(Q_k^i) \omega_i(Q_k^{i-1}, \dots, Q_k^0) \quad (50)$$

mit der Wichtungsfunktion

$$\omega_i(Q_k^{i-1}, \dots, Q_k^0) = \eta_0 \prod_{j=1}^i \eta_j(Q_k^{j-1}) \quad (51)$$

gegeben [4]. Wegen

$$I = \sum_{i=0}^n J_i. \quad (52)$$

gilt

$$\tilde{I} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=0}^n g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(Q_k^i) \omega_i(Q_k^{i-1}, \dots, Q_k^0) \right). \quad (53)$$

Äquivalent zu diesem Vorgehen ist, wiederholend für jede Streuordnungen nacheinander nur eine Stichprobe vom Umfang $N = 1$ zu erheben. Diese Stichproben Q_k^i beginnen bei der Quellemission und bestimmen anschließend Wechselwirkungsorte und -arten. Die Folge der Q_k^i ist eine MARKOV-Kette und kann auch k -te als Lebensgeschichte eines Teilchens interpretiert werden [8]. Aus der Bedingung (34), $\tau_V = 1$, folgte bereits die Forderung, dass der Phasenraum in eine gegebene, endliche Geometrie Γ_g und einen hypothetischen vollständigen Absorber Γ_a unterteilt ist. Wenn für eine Stichprobe $Q_k^i \in \Gamma_a$ gilt, so wird $i - 1 = n(k)$ gesetzt und die Berechnung der k -ten Lebensgeschichte wird abgebrochen. Die Streuordnung $n(k) + 1$, bei der die Abbruchbedingung erfüllt wird, ist dann im Allgemeinen von der Lebensgeschichte $Q_k^0, \dots, Q_k^{n(k)}$ abhängig. Das Erreichen des Absorbers wird hierbei als Teilchenescape bezeichnet. Diese Abbruchbedingung ist gleichbedeutend mit der Konvergenz der LIOUVILLE-NEUMANN-Reihe, Gleichung (14), wonach eine Lösung für $\zeta_{E\Omega}$ existiert.

Nach Gleichung (11),

$$I = \int_{\Delta\Gamma} dq f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) \zeta_{E\Omega}(q), \quad (54)$$

ist jedoch nur das Ergebnis in einem bestimmten Phasenraumbereich $\Delta\Gamma$ von Interesse. Mit Hilfe der Definition (13),

$$g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(Q_k^i) = \begin{cases} f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(Q_k^i), & Q_k^i \in \Delta\Gamma \\ 0, & Q_k^i \notin \Delta\Gamma \end{cases} \quad (55)$$

ist der Schätzer \tilde{I} für das interessierende Ergebnis I schließlich durch

$$\tilde{I} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=0}^{n(k)} g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(Q_k^i) \omega_i(Q_k^{i-1}, \dots, Q_k^0) \right) \equiv \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N G_k(Q_k^0, \dots, Q_k^{n(k)}) \quad (56)$$

gegeben. Für die empirische Standardabweichung gilt nach Gleichung (9)

$$\Delta \tilde{I} = \sqrt{\frac{1}{N \cdot (N-1)} \left(\sum_{k=1}^N G_k(Q_k^0, \dots, Q_k^{n(k)})^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{k=1}^N G_k(Q_k^0, \dots, Q_k^{n(k)}) \right)^2 \right)}. \quad (57)$$

3 Berechnung von Teilchenlebensgeschichten

Das zunächst abstrakte Erheben der Stichproben Q_1^0, \dots, Q_N^0 bis $Q_1^{n(1)}, \dots, Q_N^{n(N)}$ kann anschaulich als die Simulation von Lebensgeschichten $Q_k^0, \dots, Q_k^{n(k)}$ ($k = 1, \dots, N$) sogenannter Monte Carlo Teilchen interpretiert werden. Der dazugehörige Lebensweg ist in Abbildung 1 dargestellt. Der Umfang N muss dabei nicht von vornherein festgelegt werden. Es bietet sich eine regelmäßige Berechnung des Schätzers \tilde{I} und dessen Standardunsicherheit $\Delta \tilde{I}$ an. Bei Erreichen einer vorher definierten Genauigkeit wird die Simulation beendet.

Begonnen wird mit der Quellemission, bei der Emissionsenergie E_0 und -richtung $\vec{\Omega}_0$, Emissionsort \vec{r}_{-1} und -zeit t_{-1} festgelegt werden. Da die Zufallsvariable Q^0 durch die transformierte Quelldichte $s_{E\Omega}^T$ bestimmt ist, gehören Emissionsort und -zeit noch nicht zur nullten Streuordnung (Index -1). \vec{r}_0 und t_0 müssen erst durch das Erheben einer Stichprobe bezüglich des normierten Kerns $\tau(\vec{r}_0, \vec{r}_{-1}, E_0, \vec{\Omega}_0)$ des Transportintegraloperators (Transportprozess), Gleichung (23), ermittelt werden. Damit ergibt sich eine Realisierung $q_0 = (\vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0, t_0)$ der Zufallsvariable $Q_k^0 \sim Q^0$. Es können nun $g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(q_0)$ und $\eta_1(q_0)$ berechnet werden. η_0 ist als erwarteten Anzahl N_{fix} an Quellemissionen bereits durch die Quelldefinition gegeben.

Anschließend wird die Wechselwirkung durch das Erheben einer Stichprobe bezüglich des normierten Kerns $c(\vec{r}_i, E_{i+1}, E_i, \vec{\Omega}_{i+1}, \vec{\Omega}_i)$ des Stoßintegraloperators (Stoßprozess), Gleichung (24), durchgeführt. Durch Wiederholung von Transportprozess und Stoßprozess werden iterativ Realisierungen $q_i = (\vec{r}_i, E_i, \vec{\Omega}_i, t_i)$ der Zufallsvariablen $Q_k^i \sim Q^i$ erzeugt, mit denen $g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(q_i)$ und $\eta_{i+1}(q_i)$ berechnet werden können.

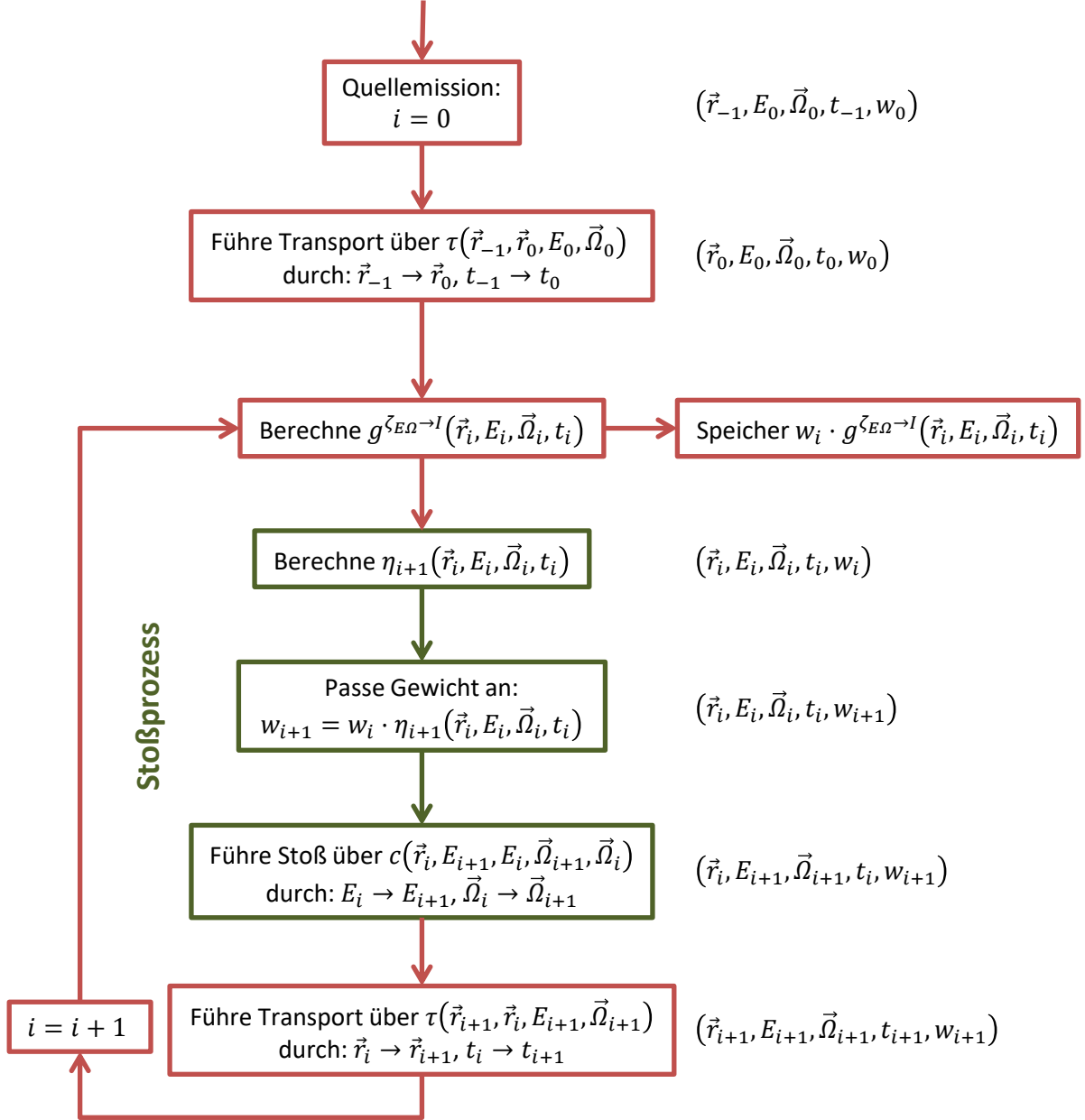


Abbildung 1: Allgemeines Vorgehen zur Berechnung einer Lebensgeschichte

Die Aufteilung in Transport und Stoß ist hierbei möglich, weil die Dichtefunktion der Verteilung $dP_{Q^i}(q_i)$ der Zufallsvariablen Q^i nach (25) und (29) über das Produkt der jeweiligen Kerne τ und c definiert ist. Sie sind damit voneinander stochastisch unabhängig. Der Kern $\tau(\vec{r}_{i+1}, \vec{r}_i, E_{i+1}, \vec{\Omega}_{i+1})$ des Transportintegraloperators ist nach (34) bereits eine Dichtefunktion. Denn es wird gefordert, dass die betrachtete Geometrie mit einem hypothetischen unendlichen Absorber umgeben ist. Nach Gleichung (33) gilt für dessen Verteilungsfunktion bezüglich eines homogenen Mediums

$$\begin{aligned}
 P(X \leq s | \vec{r}_i, E_{i+1}, \vec{\Omega}_{i+1}) &= \int_0^s dR \Sigma_t(\vec{r}_i, E_{i+1}) e^{-\Sigma_t(\vec{r}_i, E_{i+1}) \cdot R} \\
 &= \int_0^s dR \frac{1}{\Lambda_t(\vec{r}_i, E_{i+1})} e^{-R/\Lambda_t(\vec{r}_i, E_{i+1})}.
 \end{aligned} \tag{58}$$

$P(X \leq s | \vec{r}_i, E_{i+1}, \vec{\Omega}_{i+1})$ ist die Verteilungsfunktion der sogenannten Exponentialverteilung $\text{Exp}(\Lambda_t)$ mit Parameter $\Lambda_t = \Lambda_t(\vec{r}_i, E_{i+1})$ [9]. Demnach entspricht die Stichprobe für den neuen Wechselwirkungsort einer exponentialverteilten Wegstrecke $s \sim \text{Exp}(\Lambda_t)$ in Richtung $\vec{\Omega}_i$, in der keine Wechselwirkung stattfindet. Das Ergebnis des Transportprozesses ist die Überführung der Orts- und Zeitkoordinaten, $\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{i+1}$ und $t_i \rightarrow t_{i+1}$.

Die Gleichung (58) ist jedoch nur für homogene Materialien gültig, da die totale Wirkungsquerschnittsdichte $\Sigma_t(\vec{r}_i, E_{i+1})$ entlang der Wegstrecke s konstant sein muss. Aus diesem Grund muss die Geometrie in der Anwendung in räumliche Zellen, gefüllt mit homogenen Materialien, unterteilt werden. Liegt der nächste Wechselwirkungspunkt in einer anderen Zelle, so muss am Durchstoßpunkt der Grenzfläche ein neuer Wert für die Wegstrecke s mit Σ_t bezüglich des neuen Materials bestimmt werden [10].

Die Dichtefunktion für den Stoßprozess ist hingegen nach den Gleichungen (24), (29) und (35) über

$$\begin{aligned}
 c(\vec{r}_i, E_{i+1}, E_i, \vec{\Omega}_{i+1}, \vec{\Omega}_i) / \eta_{i+1}(\vec{r}_i, E_i, \vec{\Omega}_i, t_i) \\
 = \frac{1}{\eta_{i+1}(\vec{r}_i, E_i, \vec{\Omega}_i, t_i)} \sum_{j,k} \frac{Y_{j,k}(E_i)}{\Sigma_t(\vec{r}_i, E_i)} \frac{d^2 \Sigma_S^{j,k}}{dE d\Omega}(\vec{r}_i, E_i \rightarrow E_{i+1}, \vec{\Omega}_i \rightarrow \vec{\Omega}_{i+1})
 \end{aligned} \tag{59}$$

mit

$$\eta_{i+1}(\vec{r}_i, E_i, \vec{\Omega}_i, t_i) = \frac{1}{\Sigma_t(\vec{r}_i, E_i)} \sum_{j,k} Y_{j,k}(E_i) \Sigma_S^{j,k}(\vec{r}_i, E_i). \tag{60}$$

gegeben. Durch das Erheben einer Stichprobe werden neue Energie- und Richtungskoordinaten gesetzt, $E_i \rightarrow E_{i+1}$ und $\vec{\Omega}_i \rightarrow \vec{\Omega}_{i+1}$. Da Neutronen und Photonen absorbiert werden können, ist für diese Strahlungsarten der Fall $E_{i+1} = 0$ möglich. In diesem Fall muss die Simulation der Lebensgeschichte abgebrochen werden.

Nach den Gleichungen (51) und (56) wird die Wichtungsfunktion ω_i als Produkt der Normierungsfaktoren η_j mit $j = 1, \dots, i$ in dem zu berechnenden Ergebnis benötigt. Um dieses Produkt zu erhalten, wird eine weitere Teilcheneigenschaft eingeführt, das Teilchengewicht w (Abbildung 1). Mit der Quellemission wird der Anfangswert $w_0 = \eta_0$ gesetzt. Vor jedem Stoßprozess i wird iterativ das Teilchengewicht mit $\eta_{i+1}(q_i)$ multipliziert,

$$w_{i+1} = w_i \cdot \eta_{i+1}(q_i). \tag{61}$$

Somit gilt

$$w_i = \eta_i(q_{i-1}) \cdot \dots \cdot \eta_0 = \omega_i(q_{i-1}, \dots, q_0). \quad (62)$$

q_i bezieht sich hierbei auf erzeugte Realisierungen der Zufallsvariablen $Q_k^i \sim Q^i$. Auf diese Weise ist eine Vorschrift zur Berechnung eines geforderten Ergebnisses nach Gleichung (56) über

$$\tilde{I}(q_i, \dots, q_0) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=0}^{n(k)} w_i \cdot g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(q_i) \right) \quad (63)$$

gegeben. $n(k)$ bezeichnet die Streuordnung, nach welcher eine Abbruchbedingung erfüllt ist. Die Überprüfung möglicher Abbruchbedingungen muss in den entsprechenden Schritten in der Vorschrift erfolgen, werden jedoch in Abbildung 1 auf Grund der Übersichtlichkeit nicht explizit dargestellt.

4 Analoge und nicht-analoge Monte Carlo Methoden

Das durch Abbildung 1 veranschaulichte Vorgehen ist jedoch abstrakt. Zum einen ist das Teilchengewicht w eine Größe, die keine Repräsentation in der physikalischen Realität besitzt. Zum anderen ist die im Stoßprozess verwendete Dichtefunktion über die doppelt-differentielle Wirkungsquerschnittsdichte für eine Streureaktion vom Typ j am Nuklid k und der dazugehörigen Ausbeute definiert. Hier sind alle möglichen Wechselwirkungen enthalten. Das Erheben einer Stichprobe nach der Verteilung dieser Dichte gibt keine Auskunft über den Wechselwirkungsprozess, sondern nur über das Ergebnis.

Durch Umformung ist es aber möglich, eine anschaulichere Vorschrift zu erhalten. Zentral ist dabei der Erwartungswert der zu berechnenden Beiträge $g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(Q^i)$ mit den dazugehörigen Normierungsfaktoren $\eta_i(q_{i-1})$ nach (37),

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left(g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(Q^i) \eta_i(q_{i-1}) \right) &= \int_{\Gamma} dq_i \frac{k(q_i, q_{i-1})}{\eta_i(q_{i-1})} f^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(q_i) \eta_i(q_{i-1}) \\ &= \int_{\Gamma} dq_i k(q_i, q_{i-1}) f^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(q_i) = K_i(q_{i-1}). \end{aligned} \quad (64)$$

$K_i(q_{i-1})$ ist nach (27) ein Teil des zu berechnenden Integrals der Problemstellung. Für $k(q_i, q_{i-1})$ gilt nach (25)

$$k(q_i, q_{i-1}) = \tau(\vec{r}_i, \vec{r}_{i-1}, E_i, \vec{\Omega}_i) \cdot c(\vec{r}_{i-1}, E_i, E_{i-1}, \vec{\Omega}_i, \vec{\Omega}_{i-1}). \quad (65)$$

Durch Erweiterung mit der Wirkungsquerschnittsdichte $\Sigma_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})$,

$$\Sigma_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1}) = \iint_{4\pi} \int_0^\infty dE_i d\Omega_i \frac{d^2 \Sigma_S^{j,k}}{dE d\Omega}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1} \rightarrow E_i, \vec{\Omega}_{i-1} \rightarrow \vec{\Omega}_i), \quad (66)$$

für Streureaktionen vom Typ j am Nuklid k , mit der Wirkungsquerschnittsdichte $\Sigma_S^k(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})$,

$$\Sigma_S^k(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1}) = \sum_j \Sigma_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1}), \quad (67)$$

aller Streureaktionen am Nuklid k und dem relativen Massenanteil $q_k(\vec{r}_{i-1})$ mit

$$\Sigma_t^k(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1}) = q_k(\vec{r}_{i-1}) \cdot \Sigma_t(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1}) \quad (68)$$

des Nuklids k an allen Nukliden wird $c(\vec{r}_{i-1}, E_i, E_{i-1}, \vec{\Omega}_i, \vec{\Omega}_{i-1})$ zu

$$\begin{aligned} c(\vec{r}_{i-1}, E_i, E_{i-1}, \vec{\Omega}_i, \vec{\Omega}_{i-1}) &= \sum_k q_k(\vec{r}_{i-1}) \left(\frac{\Sigma_S^k(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})}{\Sigma_t^k(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})} \right) \sum_j \left(\frac{\Sigma_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})}{\Sigma_S^k(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})} \right) \\ &\quad \cdot Y_{j,k}(E_{i-1}) \frac{\frac{d^2 \Sigma_S^{j,k}}{dE d\Omega}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1} \rightarrow E_i, \vec{\Omega}_{i-1} \rightarrow \vec{\Omega}_i)}{\Sigma_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})} \\ &\equiv \sum_k P_k(\vec{r}_{i-1}) P_{NA}^k(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1}) \sum_j P_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1}) \\ &\quad \cdot \left(Y_{j,k}(E_{i-1}) \frac{\frac{d^2 \Sigma_S^{j,k}}{dE d\Omega}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1} \rightarrow E_i, \vec{\Omega}_{i-1} \rightarrow \vec{\Omega}_i)}{\Sigma_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})} \right). \end{aligned} \quad (69)$$

Hierbei sind $P_k(\vec{r}_{i-1})$ die Wahrscheinlichkeit, dass eine Wechselwirkung am Ort \vec{r}_{i-1} am Nuklid k stattfindet, $P_{NA}^k(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})$ die Nichtabsorptionswahrscheinlichkeit am Ort \vec{r}_{i-1} zur Energie E_{i-1} für das Nuklid k und $P_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})$ die Wahrscheinlichkeit, dass eine Streuung vom Typ j am Ort \vec{r}_{i-1} zur Energie E_{i-1} unter der Bedingung einer Nichtabsorption am Nuklid k auftritt. Der Erwartungswert (64) wird mit Einsetzen von (69) in (65) zu

$$\begin{aligned} &\mathbb{E} \left(f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(Q^i) \eta_i(q_{i-1}) \right) \\ &= \sum_k P_k(\vec{r}_{i-1}) P_{NA}^k(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1}) \sum_j P_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1}) \\ &\quad \cdot \mathbb{E} \left(f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(Q^i) Y_{j,k}(E_{i-1}) \right). \end{aligned} \quad (70)$$

Der Erwartungswert auf der rechten Seite der Gleichung bezieht sich auf eine Verteilung mit der Dichtefunktion

$$p_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1} \rightarrow E_i, \vec{\Omega}_{i-1} \rightarrow \vec{\Omega}_i) = \frac{\frac{d^2 \Sigma_S^{j,k}}{dE d\Omega}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1} \rightarrow E_i, \vec{\Omega}_{i-1} \rightarrow \vec{\Omega}_i)}{\Sigma_S^{j,k}(\vec{r}_{i-1}, E_{i-1})}. \quad (71)$$

Zu berücksichtigen ist hierbei noch der neue Normierungsfaktor

$$\eta_i(q_{i-1}) = \eta_i(E_{i-1}) = Y_{j,k}(E_{i-1}). \quad (72)$$

Um die Ausbeute $Y_{j,k}(E_{i-1})$ der Reaktion zu berücksichtigen, gibt es zwei grundlegende Möglichkeiten [4]. Zum einen kann diese als abstrakter Normierungsfaktor $\eta_i(E_{i-1})$ gespeichert. η_i wird dabei als weitere Eigenschaft des Monte Carlo Teilchens, das Teilchengewicht w , geführt. Zum anderen kann bei $Y_{j,k}(E_{i-1}) < 1$ durch Interpretation der Ausbeute als Wahrscheinlichkeit mit Hilfe einer gleichverteilten Stichprobe entschieden werden, ob die Lebensgeschichte fortgesetzt oder abgebrochen wird.

Für $Y_{j,k}(E_{i-1}) > 1$ hingegen wird die Lebensgeschichte in $m = \lfloor Y_{j,k}(E_{i-1}) \rfloor$ Teile mit der Wahrscheinlichkeit $P = m + 1 - Y_{j,k}(E_{i-1})$ und in $m + 1$ Teile mit der Wahrscheinlichkeit $1 - P$ aufgeteilt. Dieses Verfahren wird auch Teilchensplitting genannt [11]. Während ein Teil als Primärlebensgeschichte weiter berechnet wird, werden alle weiteren als Sekundärteilchen simuliert.

Eine auf diese Weise durchgeführte Monte Carlo Methode zur Simulation der Lebensgeschichten von Teilchen heißt analoge Monte Carlo Methode. Diese verläuft analog zur physikalischen Realität, bei der kein Teilchengewicht existiert und immer nur eine bestimmte Wechselwirkung stattfinden kann. Der Normierungsfaktor hat immer den Wert

$$\eta_i(q_{i-1}) = 1 \quad (73)$$

und muss nicht berücksichtigt werden. Das Vorgehen zur Durchführung des analogen Stoßprozesses ist in Abbildung 2 dargestellt.

Wird jedoch kein Teilchensplitting zur Berücksichtigung der Ausbeute verwendet, so muss dafür die Größe Teilchengewicht zum Erhalt der Erwartungstreue eingeführt werden. Dadurch verläuft die Simulation nicht-analog. Jedes Monte Carlo Teilchen steht dann für eine Teilchenpopulation, dessen Größe durch das Gewicht w gemessen wird. Nach Gleichung (56) geht das Produkt aller Normierungsfaktoren $\eta_i(q_{i-1})$ in den Schätzer des Ergebnisses ein. Daher ist bei nicht-analoger Simulation zu jeder Wechselwirkung das Gewicht mit dem Normierungsfaktor $\eta_i(q_{i-1})$ zu multiplizieren.

Nicht-analoge Monte Carlo Methoden stehen besonders im Fokus bei der Steigerung der Effizienz einer Simulation. Das Teilchengewicht dient dabei als Instrument, Veränderungen gegenüber der physikalischen Realität auszugleichen. Diese Veränderungen werden durch Transformationen der Integralkerne vorgenommen, was den Normierungsfaktor $\eta_i(q_{i-1})$ neu bestimmt. Somit wird die Erwartungstreue des Schätzers erhalten.

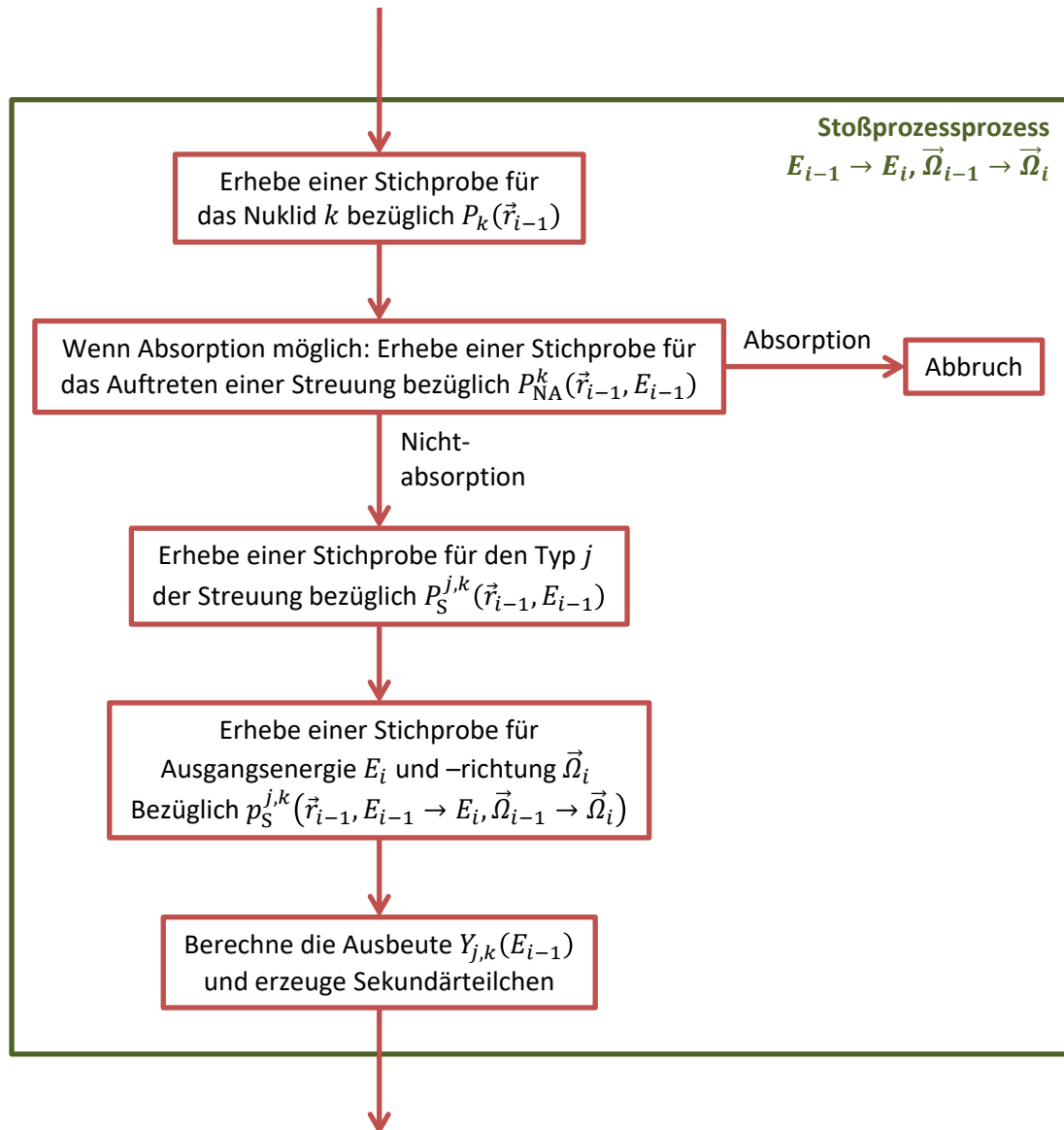


Abbildung 2: Umsetzung des analogen Stoßprozesses

5 Literatur

- [1] B. LAPEYRE, E. PARDOUX, R. SENTIS: „Introduction to Monte-Carlo Methods for Transport and Diffusion Equations“. Oxford: Oxford Univ Pr, 2003.
- [2] K.D. SCHMIDT: „Maß und Wahrscheinlichkeit“, Auflage: 1. Berlin: Springer, 2009.
- [3] I. BIPM, I. IFCC, I. ISO: „IUPAP, and OIML. Evaluation of measurement data—supplement 1 to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement”—propagation of distributions using a Monte Carlo method. Joint Committee for Guides in Metrology, JCGM 101: 2008“, Int. Organ. Stand. Geneva, 2008.
- [4] I. LUX, L. KOBLINGER: „Monte Carlo particle transport methods: neutron and photon calculations“. CRC Press, 1991.
- [5] J.J. DUDERSTADT, W.R. MARTIN: „Transport Theory“. Wiley, 1979.
- [6] G.J. GBUR: „Mathematical Methods for Optical Physics and Engineering“. Cambridge; New York: Cambridge University Press, 2011.
- [7] K. HELBIG: „(Persönliche Mitteilung, 01.09.2014)“.
- [8] J. SPANIER, E.M. GELBARD: „Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems“. Addison-Wesley, 1969.
- [9] L. PAPULA: „Mathematik für Ingenieure und Naturwissenschaftler Band 3: Vektoranalysis, Wahrscheinlichkeitsrechnung, Mathematische Statistik, Fehler- und Ausgleichsrechnung“, Auflage: 6., Überarb. u. erw. Aufl. 2011. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, 2011.
- [10] F.S. GAVALDÀ, J.M.F. VAREA, J.S. ROMA, O. DE C. I D. ECONÒMIC: „PENELOPE 2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport : Workshop Proceedings, Barcelona, Spain 30 June-3 July 2008“. OECD, 2009.
- [11] T.E. BOOTH, H.G. HUGHES, A. ZUKAITIS, F.B. BROWN, R.D. MOSTELLER, M. BOGGS, J.S. BULL, R.E. PRAEL, R. MARTZ, R.A. FORSTER, A. SOOD, J.T. GOORLEY, J.E. SWEETZY: „MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory“. Los Alamos National Laboratory, 2003.

Anhang B: Importance Sampling im Strahlungstransport

Inhalt

1	Mathematische Betrachtung	2
2	Anwendung auf die Strahlungstransporttheorie	4
3	Bezug zur Adjungierten Theorie	7
4	Literatur	10

1 Mathematische Betrachtung

Gesucht ist der Wert eines gegebenen Integrals I ,

$$I = \int_a^b dx h(x) f(x). \quad (1)$$

Die Lösung mittels Monte Carlo Methode erfolgt durch Interpretation von I als Erwartungswert [1] und damit $f(x)$ bis auf Normierung als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Verteilung

$$dP_X(x) = dx \frac{1}{\eta} \cdot f(x), \quad (2)$$

$$\eta = \int_a^b dx f(x), \quad (3)$$

welche durch die Zufallsvariable X bestimmt wird. Mit dem arithmetischen Mittel

$$\tilde{I}(X_1, \dots, X_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta \cdot h(X_i), \quad (4)$$

ist ein erwartungstreuer Schätzer für I definiert, der über eine Stichprobe X_1, \dots, X_N vom Umfang N berechnet wird [2]. Die Standardunsicherheit $\Delta \tilde{I}$ von \tilde{I} ergibt sich zu [3, 4]

$$\Delta \tilde{I}(X_1, \dots, X_N) = \sqrt{\frac{1}{N \cdot (N-1)} \left(\sum_{i=1}^N \eta^2 \cdot h(X_i)^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N \eta \cdot h(X_i) \right)^2 \right)}. \quad (5)$$

Im Allgemeinen sind die einzelnen Beiträge $h(X_j)$ nicht gleich groß. Das Ziel von Importance Sampling ist, signifikante Beiträge mit einer höheren Wahrscheinlichkeit zu erzeugen und damit die Effizienz der Monte Carlo Methode zu verbessern [5].

Um dieses Ziel zu erreichen, wird der Integrand in Gleichung (1) formal mit einer Dichtefunktion $\bar{f}(x)$ erweitert,

$$I = \int_a^b dy \frac{f(y)}{\bar{f}(y)} h(y) \cdot \bar{f}(y) \equiv \int_a^b dy \bar{h}(y) \cdot \bar{f}(y). \quad (6)$$

Diese wird Importance-Funktion genannt und ist überall dort null, wo $h(y)$ null ist.

$\bar{f}(y)$ stellt ein Maß für die Signifikanz (Importance) von $h(y)$ dar und wird durch die Zufallsvariable Y bestimmt. Die dazugehörige Verteilung ist

$$dP_Y(y) = dy \frac{1}{\bar{\eta}} \cdot \bar{f}(y), \quad (7)$$

$$\bar{\eta} = \int_a^b dy \bar{f}(y). \quad (8)$$

Ein erwartungstreuer Schätzer $\tilde{I}(Y_1, \dots, Y_N)$ für das modifizierte Integral I ist durch das arithmetische Mittel

$$\tilde{I}(Y_1, \dots, Y_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{\eta} \cdot \frac{f(Y_i)}{\bar{f}(Y_i)} h(Y_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{\eta} \cdot \bar{h}(Y_i), \quad (9)$$

gegeben. Dessen Standardunsicherheit ergibt sich nach Gleichung (5) zu

$$\Delta \tilde{I}(Y_1, \dots, Y_N) = \sqrt{\frac{1}{N \cdot (N-1)} \left(\sum_{i=1}^N \bar{\eta}^2 \cdot \bar{h}(Y_i)^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N \bar{\eta} \cdot \bar{h}(Y_i) \right)^2 \right)}. \quad (10)$$

Der Nutzen dieser Modifikation wird aus dem Erwartungswert von $(\Delta \tilde{I})^2$ ersichtlich [6]. Dieser ergibt sich zu [2]

$$\mathbb{E}((\Delta \tilde{I})^2) = \frac{\bar{\eta}}{N} \int_a^b dy \frac{f(y)^2}{\bar{f}(y)} h(y)^2 - \frac{I^2}{N}. \quad (11)$$

Die Importance-Funktion $\bar{f}(x)$ beeinflusst Standardunsicherheit des Schätzers $\tilde{I}(Y_1, \dots, Y_N)$. Durch die Wahl

$$\bar{f}(y) = f(y) \frac{\bar{\eta} h(y)}{I} \quad (12)$$

wird der Erwartungswert (11) sogar null [7]. Da aber das Ergebnis I nicht bekannt ist, besitzt dies keine praktische Anwendung. Es zeigt jedoch, dass eine sehr effiziente Monte Carlo Methode durch eine geschickte Wahl erreicht werden kann [8].

Wird die Importance-Funktion $\bar{f}(x)$ schlecht gewählt, so kann die Effizienz der Monte Carlo Methode mit Importance Sampling sogar kleiner sein, als ohne [6]. Dies folgt aus dem Erwartungswert der Differenz von $(\Delta\tilde{I})^2$ mit und ohne Importance-Funktion

$$\mathbb{E} \left((\Delta\tilde{I})^2(X_1, \dots, X_N) - (\Delta\tilde{I})^2(Y_1, \dots, Y_N) \right) = \frac{1}{N} \int_a^b h(x)^2 f(x) \left[1 - \frac{f(x)}{\bar{f}(x)} \right] dx, \quad (13)$$

welcher im Allgemeinen nicht positiv sein muss.

Mit der optimalen Wahl (12) bietet sich jedoch an, zunächst I über $\tilde{I}(X_1, \dots, X_M)$ nach Gleichung (4) mit einer Stichprobe X_1, \dots, X_M vom einem geringen Umfang M abzuschätzen. Mit dem erhaltenen Ergebnis kann die Importance-Funktion somit nach (12) näherungsweise bestimmt werden. Anschließend wird I über $\tilde{I}(Y_1, \dots, Y_N)$ mit einer Stichprobe vom hohen Umfang $N \gg M$ mit geringerer empirischer Varianz und folglich höherer Effizienz berechnet [9].

2 Anwendung auf die Strahlungstransporttheorie

Im Folgenden wird die Anwendung von Importance Sampling bei der Lösung von Strahlungstransportproblemen mit Monte Carlo Methode betrachtet. Das Ziel ist die Berechnung des Integrals

$$I = \int_{\Delta\Gamma} f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) \cdot \zeta_{E\Omega}(q) dq \quad (14)$$

mit $\Delta\Gamma = [q, q + \Delta q]$ und $q = (\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ [6]. Entsprechend Anhang A erfolgt dies durch die Zerlegung der Stoßteilchendichte

$$\zeta_{E\Omega}(q) = \sum_{i=0}^n \zeta_{E\Omega}^i(q) \quad (15)$$

in Streuordnungen i und Erweiterung des Integrationsbereichs von (14) auf den gesamten Phasenraum,

$$I = \int_{\Gamma} dq g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) \zeta_{E\Omega}(q), \quad (16)$$

mit $g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}$ nach

$$g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) = \begin{cases} f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q), & q \in \Delta\Gamma \\ 0, & q \notin \Delta\Gamma \end{cases}. \quad (17)$$

Das Ergebnis ist

$$I = \sum_{i=0}^n \int_{\Gamma} dq g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) \zeta_{E\Omega}^i(q) \equiv \sum_{i=0}^n J_i. \quad (18)$$

mit

$$\begin{aligned}
 J_i = & \int_{\Gamma} dq_i g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q_i) \int_{\Gamma} dq_{i-1} k(q_i, q_{i-1}) \int_{\Gamma} dq_{i-2} k(q_{i-1}, q_{i-2}) \dots \\
 & \dots \int_{\Gamma} dq_1 k(q_2, q_1) \int_{\Gamma} dq_0 k(q_1, q_0) s_{E\Omega}^T(q_0).
 \end{aligned} \tag{19}$$

Die Lösung mit Monte Carlo Methoden resultiert in die Berechnung von N Lebensgeschichten, Index $k = 1, \dots, N$, welche Stichproben $Q_k^1, \dots, Q_k^{n(k)}$ der Streuordnungen $i = 1, \dots, n(k)$ erzeugen. $n(k)$ steht hierbei für die Streuordnung, nach welcher eine Abbruchbedingung, zum Beispiel Teilchenescape, erfüllt wurde. $s_{E\Omega}^T(q) = \zeta_{E\Omega}^0(q) = s_{E\Omega}^T(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \mathcal{T}(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot s_{E\Omega}(\vec{r}', t', E, \vec{\Omega})$ ist hierbei die mit dem Transportintegraloperator transformierte Quelldichte.

Formal ist durch

$$\tilde{J}_i(Q_k^i, \dots, Q_k^0) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(Q_k^i) \omega_i(Q_k^{i-1}, \dots, Q_k^0), \tag{20}$$

$$\omega_i(Q_k^{i-1}, \dots, Q_k^0) = \eta_0 \prod_{j=1}^i \eta_j(Q_k^{j-1}), \tag{21}$$

$$\eta_j(q_{j-1}) = \int_{\Gamma} dq_j k(q_j, q_{j-1}), \tag{22}$$

$$\eta_0 = \int_{\Gamma} dq_0 s_{E\Omega}^T(q_0), \tag{23}$$

ein erwartungstreuer Schätzer für J_i gegeben. Die Funktion $k(q_j, q_{j-1})$ ist hier das Produkt der Integralkerne c und τ des Stoßintegraloperators \mathcal{C} und des Transportintegraloperators \mathcal{T} . Diese sind über

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_V dV' \tau(\vec{r}, \vec{r}', E, \vec{\Omega}) \tag{24}$$

und

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}(\vec{r}', E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \iint_{4\pi} \int_0^\infty d\Omega' dE' c(\vec{r}', E, E', \vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \tag{25}$$

mit

$$\tau(\vec{r}, \vec{r}', E, \vec{\Omega}) = \Sigma_t(\vec{r}, E) e^{-\int_{(\vec{r}' \rightarrow \vec{r})} \Sigma_t(r, E) dr} \cdot \delta(\vec{r} - \vec{\Omega} \cdot |\vec{r} - \vec{r}'|) \tag{26}$$

und

$$c(\vec{r}', E, E', \vec{\Omega}, \vec{\Omega}') = \sum_{j,k} \frac{Y_{j,k}(E')}{\Sigma_t(\vec{r}', E')} \cdot \frac{d^2 \Sigma_S^{j,k}}{dE d\Omega}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \quad (27)$$

definiert [6]. Die Größe $d^2 \Sigma_S^{j,k}/dE d\Omega$ ist die doppelt-differentielle Wirkungsquerschnittsdichte für eine Streureaktion vom Typ j am Nuklid k , wobei sich die Teilchenenergie von E' in E und die Richtung von $\vec{\Omega}'$ in $\vec{\Omega}$ ändert. $Y_{j,k}$ ist die Ausbeute, die mittlere Anzahl entstehender Teilchen.

Entsprechend der allgemeinen Betrachtung kann das zu berechnende Integral (19) nun mittels einer Importance-Funktion erweitert werden. Dies ist jedoch für alle Integrale über die Variablen q_1 bis q_i durchzuführen. Es folgt

$$\begin{aligned} J_i = \int_{\Gamma} dq_i g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(q_i) \int_{\Gamma} dq_{i-1} \bar{k}(q_i, q_{i-1}) \frac{k(q_i, q_{i-1})}{\bar{k}(q_i, q_{i-1})} \dots \\ \dots \int_{\Gamma} dq_0 \bar{k}(q_1, q_0) \frac{k(q_1, q_0)}{\bar{k}(q_1, q_0)} \bar{s}_{E\Omega}^T(q_0). \end{aligned} \quad (28)$$

Der Schätzer (20) wird dann zu

$$\tilde{J}_i(\bar{Q}_k^i, \dots, \bar{Q}_k^0) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(\bar{Q}_k^i) \bar{\omega}_i(\bar{Q}_k^i, \dots, \bar{Q}_k^0), \quad (29)$$

$$\bar{\omega}_i(\bar{Q}_k^i, \dots, \bar{Q}_k^0) = \bar{\eta}_0 \frac{s_{E\Omega}^T(\bar{Q}_k^0)}{\bar{s}_{E\Omega}^T(\bar{Q}_k^0)} \prod_{j=1}^i \frac{k(\bar{Q}_k^j, \bar{Q}_k^{j-1})}{\bar{k}(\bar{Q}_k^j, \bar{Q}_k^{j-1})} \bar{\eta}_j(\bar{Q}_k^{j-1}), \quad (30)$$

$$\bar{\eta}_j(q_{j-1}) = \int_{\Gamma} dq_j \bar{k}(q_j, q_{j-1}). \quad (31)$$

$$\bar{\eta}_0 = \int_{\Gamma} dq_0 \bar{s}_{E\Omega}^T(q_0), \quad (32)$$

mit den Zufallsvariablen $\bar{Q}_k^i, \dots, \bar{Q}_k^0$ der transformierten Verteilungen

$$dP_{\bar{Q}^i}(q_i) = dq_i \frac{\bar{k}(q_i, q_{i-1})}{\bar{\eta}_i(q_{i-1})} \quad (33)$$

mit

$$dP_{\bar{Q}^0}(q_0) = dq_0 \frac{\bar{s}_{E\Omega}^T(q_0)}{\bar{\eta}_0}. \quad (34)$$

Entsprechend der Definition der Funktion $k(q_i, q_{i-1})$ wird

$$\int_{\Gamma} dq' \bar{k}(q, q') = \int_V \int_{4\pi} \int_0^\infty dV' d\Omega' dE' \bar{c}(\vec{r}, \vec{r}', E, \vec{\Omega}) \bar{c}(\vec{r}', E, E', \vec{\Omega}, \vec{\Omega}') = \bar{T} \cdot \bar{C} \quad (35)$$

definiert.

Daraus lässt sich eine entsprechend modifizierte Strahlungstransportgleichung [9, 10] ableiten. Diese lautet

$$\bar{\zeta}_{E\Omega}(q) = \bar{s}_{E\Omega}^{\bar{T}}(q) + \bar{T} \cdot \bar{C} \cdot \bar{\zeta}_{E\Omega}(q'). \quad (36)$$

Hierbei sind $\bar{\zeta}_{E\Omega}$ die modifizierte Stoßteilchendichte und $\bar{s}_{E\Omega}^{\bar{T}}$ die modifizierte, transformierte Quellteilchendichte,

$$\bar{s}_{E\Omega}^{\bar{T}}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) = \bar{T}(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot \bar{s}_{E\Omega}(\vec{r}', t', E, \vec{\Omega}). \quad (37)$$

Durch diese Modifikationen verlaufen Monte Carlo Methoden mit Importance Sampling nicht mehr analog zur Beschreibung der Strahlungsausbreitung nach der Strahlungstransportgleichung BOLTZMANN'schen Typs und gehören daher zu den nicht-analogen Monte Carlo Methoden.

3 Bezug zur Adjungierten Theorie

R.R. COVEYOU, V.R. CAIN und K.J. YOST zeigen in [10], dass mit dem Ansatz

$$\bar{\zeta}_{E\Omega}(q) = \xi(q) \cdot \zeta_{E\Omega}(q) \quad (38)$$

eine allgemeine optimale Importance-Funktion zur Minimierung der Standardunsicherheit $\Delta \tilde{f}_i$ des Schätzers \tilde{f}_i angegeben werden kann. Diese wird von den Autoren jedoch mit geringer Aussagekraft bewertet. Sie können aber zeigen, dass eine nahezu optimale Wahl mit dem Teilchenwert $\zeta_{E\Omega}^*(q)$ bzw. der adjungierten Stoßteilchendichte getroffen wird,

$$\xi(q) = \zeta_{E\Omega}^*(q). \quad (39)$$

$\zeta_{E\Omega}^*$ erfüllt die adjungierte Strahlungstransportgleichung [6, 11],

$$\zeta_{E\Omega}^*(q) = g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) + C^* \cdot T^* \cdot \zeta_{E\Omega}^*(q'). \quad (40)$$

Für die modifizierten Größen ergibt sich dann

$$\bar{k}(q_i, q_{i-1}) = k(q_i, q_{i-1}) \cdot \frac{\zeta_{E\Omega}^*(q_i)}{\zeta_{E\Omega}^*(q_{i-1})}, \quad (41)$$

$$\bar{s}_{E\Omega}^{\bar{T}}(q_0) = s_{E\Omega}^T(q_0) \cdot \zeta_{E\Omega}^*(q_0). \quad (42)$$

Die Wichtungsfunktion $\bar{\omega}_i(\bar{Q}_k^i, \dots, \bar{Q}_k^0)$, Gleichung (30), vereinfacht sich damit zu

$$\bar{\omega}_i(\bar{Q}_k^i, \dots, \bar{Q}_k^0) = \frac{\bar{\eta}_0}{\zeta_{E\Omega}^*(\bar{Q}_k^i)} \prod_{j=1}^i \bar{\eta}_j(\bar{Q}_k^{j-1}) \quad (43)$$

und es gilt die Abhängigkeit [12]

$$\bar{\omega}_i \propto \frac{1}{\zeta_{E\Omega}^*(\bar{Q}_k^i)} . \quad (44)$$

Die Wichtungsfunktion ist demnach indirekt proportional zum Teilchenwert $\zeta_{E\Omega}^*$.

Für den zu minimierenden Erwartungswert $\mathbb{E}([\Delta\tilde{J}_i(\bar{Q}_k^i, \dots, \bar{Q}_k^0)]^2)$ folgt

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}([\Delta\tilde{J}_i(\bar{Q}_k^i, \dots, \bar{Q}_k^0)]^2) \\ &= \frac{1}{N} \sigma^2 (g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(\bar{Q}_k^i) \bar{\omega}_i(\bar{Q}_k^i, \dots, \bar{Q}_k^0)) \\ &= \frac{1}{N} \mathbb{E}([g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(\bar{Q}_k^i) \bar{\omega}_i(\bar{Q}_k^i, \dots, \bar{Q}_k^0)]^2) \\ &\quad - \frac{1}{N} [\mathbb{E}(g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(\bar{Q}_k^i) \bar{\omega}_i(\bar{Q}_k^{i-1}, \dots, \bar{Q}_k^0))]^2 \\ &= \frac{1}{N} \int dq_i \dots \int dq_0 \cdot \bar{\eta}_i(q_{i-1}) \cdot \dots \cdot \bar{\eta}_1(q_0) \cdot \bar{\eta}_0 \\ &\quad \cdot \frac{[g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q_i) \cdot k(q_i, q_{i-1}) \cdot \dots \cdot k(q_1, q_0) \cdot s_{E\Omega}^T(q_0)]^2}{\bar{k}(q_i, q_{i-1}) \cdot \dots \cdot \bar{k}(q_1, q_0) \cdot \bar{s}_{E\Omega}^T(q_0)} - \frac{1}{N} J_i^2 \\ &= \frac{1}{N} \int dq_i \dots \int dq_0 g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q_i) \cdot k(q_i, q_{i-1}) \cdot \dots \cdot k(q_1, q_0) \cdot s_{E\Omega}^T(q_0) \\ &\quad \cdot J_i \cdot (1 - p^*(q_i)) \cdot p^*(q_{i-1}) \cdot \dots \cdot p^*(q_0) - \frac{1}{N} J_i^2 . \end{aligned} \quad (45)$$

Hierbei ist

$$p^*(q) = 1 - \frac{g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q)}{\zeta_{E\Omega}^*(q)} \quad (46)$$

ein Faktor, für welchen die Beziehung $p^*(q) \leq 1$ wegen Gleichung (40) mit $g^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(q) \geq 0$ gilt. p^* ist die Nichtabsorptionswahrscheinlichkeit [13]. Daraus folgt für (45)

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{E} \left([\Delta \tilde{J}_i(\bar{Q}_k^i, \dots, \bar{Q}_k^0)]^2 \right) \\
 &= \frac{1}{N} \int dq_i \dots \int dq_0 g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(q_i) \cdot k(q_i, q_{i-1}) \cdot \dots \cdot k(q_1, q_0) \cdot s_{E\Omega}^T(q_0) \\
 &\quad \cdot J_i \cdot (1 - p^*(q_i)) \cdot p^*(q_{i-1}) \cdot \dots \cdot p^*(q_0) - \frac{1}{N} J_i^2 \\
 &\leq \frac{1}{N} \mathbb{E} \left([g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(Q_k^i) \omega_i(Q_k^{i-1}, \dots, Q_k^0)]^2 \right) \\
 &\quad - \frac{1}{N} \left[\mathbb{E} \left(g^{\zeta_{E\Omega \rightarrow I}}(Q_k^i) \omega_i(Q_k^{i-1}, \dots, Q_k^0) \right) \right]^2 \\
 &= \mathbb{E} \left([\Delta \tilde{J}_i(Q_k^i, \dots, Q_k^0)]^2 \right).
 \end{aligned} \tag{47}$$

Die Standardunsicherheit des Schätzers \tilde{J}_i ist demnach reduziert.

G. GOERTZEL und H. KALOS zeigen in [13], dass theoretisch ein Schätzer mit einer Standardunsicherheit von null unter Verwendung der adjungierten Stoßteilchendichte möglich ist. Dabei wird jedoch der Beitrag nicht in jeder Streuordnung saldiert, sondern nur bei Absorptionsreaktionen [6, 10, 12].

Wie bereits bei der allgemeinen Betrachtung von Importance Sampling bemerkt, hat auch die Verwendung der adjungierten Größen keine direkte praktische Bedeutung. Auch diese müssen zunächst berechnet werden, womit das Problem dann jedoch bereits gelöst ist. Da umgekehrt für die adjungierte Monte Carlo Methode mit Importance Sampling die Stoßteilchendichte $\zeta_{E\Omega}$ zu einer nahezu optimale Importance-Funktion führt [9], folgt auch hier die Möglichkeit eines iterativen Algorithmus zur Berechnung einer geeigneten Importance-Funktion. Vorwärts gerichtete und adjungierte Importance-Funktion werden dabei abwechselnd über einen vergleichsweise geringen Umfang an Stichproben für Lebensgeschichten berechnet und so sukzessive verbessert.

4 Literatur

- [1] B. LAPEYRE, E. PARDOUX, R. SENTIS: „Introduction to Monte-Carlo Methods for Transport and Diffusion Equations“. Oxford: Oxford Univ Pr, 2003.
- [2] L. PAPULA: „Mathematik für Ingenieure und Naturwissenschaftler Band 3: Vektoranalysis, Wahrscheinlichkeitsrechnung, Mathematische Statistik, Fehler- und Ausgleichsrechnung“, Auflage: 6., Überarb. u. erw. Aufl. 2011. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, 2011.
- [3] D. ISO: „11929–Bestimmung der charakteristischen Grenzen (Erkennungsgrenze, Nachweisgrenze und Grenzen des Vertrauensbereichs) bei Messungen ionisierender Strahlung–Grundlagen und Anwendungen (ISO 11929: 2010)“, Dtsch. Fass., 1, 2011.
- [4] BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP, OIML: „Evaluation of measurement data—supplement 1 to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement”—propagation of distributions using a Monte Carlo method. Joint Committee for Guides in Metrology, JCGM 101: 2008“, Int. Organ. Stand. Geneva, 2008.
- [5] G. FISHMAN: „Monte Carlo“. Springer Science & Business Media, 1996.
- [6] I. LUX, L. KOBLINGER: „Monte Carlo particle transport methods: neutron and photon calculations“. CRC Press, 1991.
- [7] H. KAHN: „Estimation of particle transmission by random sampling“, Natl. Bur. Stand. Appl. Math. Ser., 12, 1951.
- [8] H. KAHN: „Use of Different Monte Carlo Sampling Techniques“. Rand Corporation, 1955.
- [9] J. SPANIER, E.M. GELBARD: „Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems“. Addison-Wesley, 1969.
- [10] R.R. COVEYOU, V.R. CAIN, K.J. YOST: „Adjoint and Importance In Monte Carlo Application“, Nucl. Sci. Eng., 27 (2), 219–234, 1967.
- [11] D. GABLER: „Implementierung des adjungierten Teilchentransports in nichtanaloge Monte-Carlo-Algorithmen“. Diplomarbeit, TU Dresden, 2005.
- [12] J.E. HOOGENBOOM: „Monte Carlo zero-variance schemes: Theory, demonstration and practical consequences“, Proc. MC2003 Gatlinburg April, 6–11, 2003.
- [13] GOERTZEL, G., KALOS, H.: „Monte Carlo Methods in Transport Problems“, Prog. Nucl. Energy Ser. Phys. Math., 1 (2), 315–369, 1958.

Anhang C: Adjungierte Monte Carlo Methoden

Inhalt

1	Einleitung	2
2	Adjungierte Strahlungstransportgleichung	3
3	Literatur	5

1 Einleitung

Analoge Monte Carlo Methoden sind vergleichsweise ineffizient, wenn Probleme mit einem Detektor, dessen Volumen viel kleiner als das der Quelle ist, gelöst werden müssen. In diesem Fall ergibt sich die Wahrscheinlichkeit, dass ein Quellteilchen den Detektor trifft und dort Beiträge zum Ergebnis macht, als besonders gering. Ein Beispiel ist die Dosismessung eines kontaminierten Erdbodens, welches in Abbildung 1 skizziert ist.

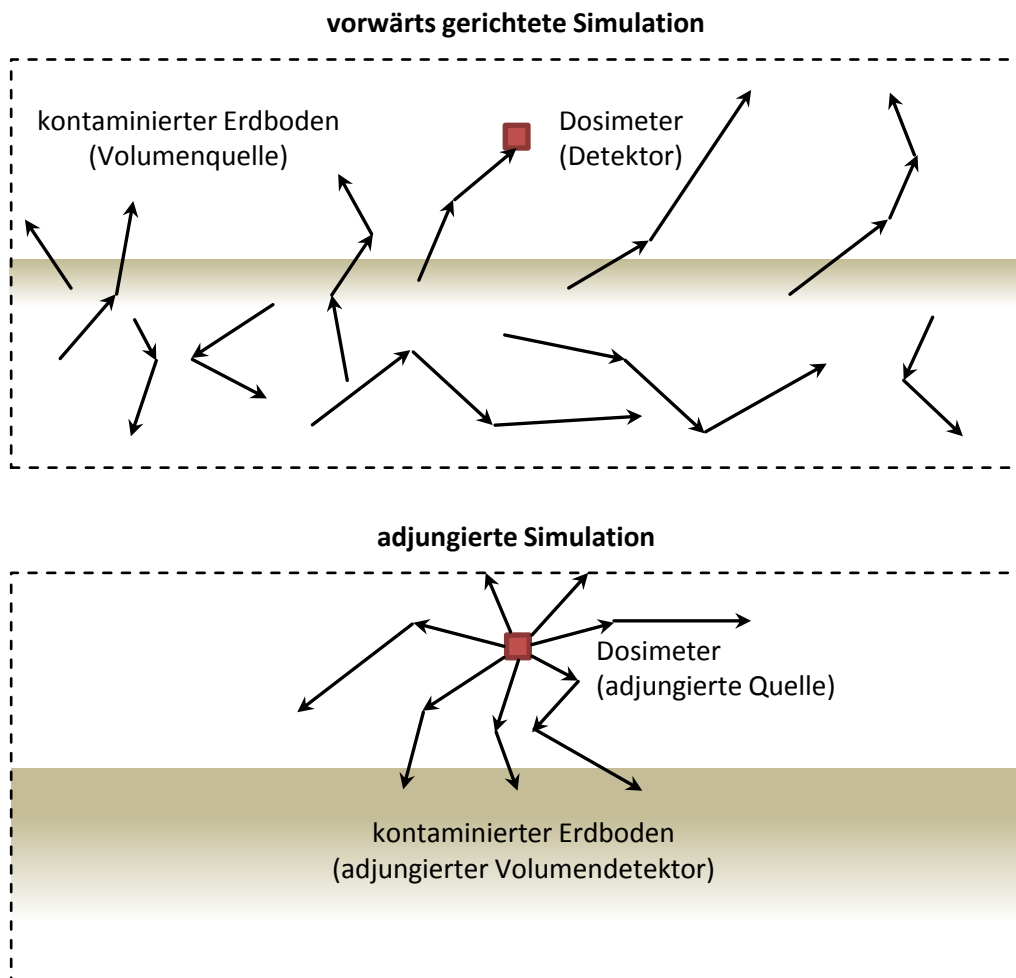


Abbildung 1: Vergleich der vorwärts gerichteten Monte Carlo Methode mit der adjungierten Simulation am Beispiel der Dosismessung eines kontaminierten Erdbodens anhand beispielhafter Teilchenlebensgeschichten

Bei dieser Problemstellung ist das Quellvolumen praktisch unendlich ausgedehnt. Dadurch wird der Detektor punktförmig. Hier bietet sich die Lösung mit der sogenannten adjungierten Monte Carlo Methode an [1, 2], bei der die Rollen von Detektor und Quelle vertauscht werden. Mit zusätzlicher Anpassung der Emissionsrichtung der adjungierten Quelle ist die effizienzsteigernde Wirkung offensichtlich, da auf diese Weise jede Lebensgeschichte einen Beitrag zum Ergebnis liefert.

2 Adjungierte Strahlungstransportgleichung

Das zentrale Element adjungierter Simulation ist die Einführung des sogenannten Teilchenwerts. Dieser wird in der englisch sprachigen Literatur als „Importance“ oder „Value“ bezeichnet [1, 3–6]. Der Teilchenwert $\zeta_{E\Omega}^*(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ im infinitesimalen Kugelvolumen ΔV am Ort \vec{r} ist der erwartete Detektorbeitrag, den ein Teilchen in seiner gesamten Lebensgeschichte machen wird, bevor es in ΔV einer Wechselwirkung unterliegt. $\zeta_{E\Omega}^*$ wird auch als die adjungierte Stoßteilchendichte bezeichnet. Dieser setzt sich formal aus dem Beitrag $f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega})$ in ΔV und aus allen erwarteten zukünftigen Beiträge außerhalb von ΔV zusammen. Letztere ergeben sich schließlich aus der Zusammenfassung aller Teilchenwerte $\zeta_{E'\Omega'}^*(\vec{r}', t', E', \vec{\Omega}')$ entlang der Emissionsrichtung $\vec{\Omega}'$, integriert über alle Streuenergien E' und Emissionsrichtungen $\vec{\Omega}'$. Es folgt

$$\begin{aligned} \zeta_{E\Omega}^*(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) &= f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) \\ &+ C^*(\vec{r}, E \rightarrow E', \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') \cdot \mathcal{T}^*(\vec{r} \rightarrow \vec{r}', E', \vec{\Omega}') \cdot \zeta_{E'\Omega'}^*(\vec{r}', t', E', \vec{\Omega}'), \end{aligned} \quad (1)$$

die sogenannte adjungierte Strahlungstransportgleichung [1, 7] mit den Integraloperatoren

$$\mathcal{T}^*(\vec{r} \rightarrow \vec{r}', E', \vec{\Omega}') = \int_0^\infty dR \Sigma_t(\vec{r}', E') e^{-\int_0^R \Sigma_t(\vec{r}+R'\cdot\vec{\Omega}, E) dR'}, \quad (2)$$

dem adjungierter Transportintegraloperator und

$$C^*(\vec{r}, E \rightarrow E', \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') = \iint_{4\pi} \int_0^\infty dE' d\Omega' \frac{\frac{d^2 \Sigma_S}{dE d\Omega}(\vec{r}, E \rightarrow E', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})}{\Sigma_t(\vec{r}, E)} \quad (3)$$

dem adjungierter Stoßintegraloperator.

Die Lösung der adjungierten Strahlungstransportgleichung (1) erfolgt analog zur Vorgehensweise bezüglich der integralen Stoßteilchendichtegleichung [1]. Die Lebensgeschichte eines adjungierten Teilchens beginnt im Detektor (adjungierte Quelle). Das interessierende Ergebnis sind Beiträge in der Quelle (adjungierter Detektor). Diese Interpretation ergibt sich aus dem Vergleich der adjungierten Integraloperatoren (2) und (3) mit den entsprechenden Operatoren der integralen Stoßteilchendichtegleichung. Aus diesem Grund werden die adjungierte Simulation auch als rückwärts gerichtet und die Simulation bezüglich der integralen Strahlungstransportgleichung als vorwärts gerichtet bezeichnet [1, 4, 7, 8].

Das Ergebnis der Simulationsaufgabe, der interessierende Effekt I , wird über die vorwärts gerichtete Stoßteilchendichte $\zeta_{E\Omega}$ nach

$$I = \iiint_{\Delta\Omega} \int_{\Delta E} \int_{\Delta t} \int_{\Delta V} f^{\zeta_{E\Omega} \rightarrow I}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) \cdot \zeta_{E\Omega}(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) dV dt dE d\Omega. \quad (4)$$

berechnet. Aus der adjungierten Beschreibung ergibt sich eine äquivalente Darstellung [1],

$$I = \iiint_{\Delta\Omega} \int_{\Delta E} \int_{\Delta t} \int_{\Delta V} \zeta_{E\Omega}^*(\vec{r}, t, E, \vec{\Omega}) \cdot \mathcal{T} \cdot s_{E\Omega}(\vec{r}', t', E, \vec{\Omega}) dV dt dE d\Omega, \quad (5)$$

mit dem Transportintegraloperator nach (2). Die Gleichheit von (4) und (5) kann durch Multiplikation der adjungierten Strahlungstransportgleichung (1) mit der Stoßteilchendichte $\zeta_{E\Omega}$ und der vorwärts gerichteten Stoßteilchendichtegleichung mit dem Teilchenwert $\zeta_{E\Omega}^*$ gezeigt werden, wenn die sich ergebenden Gleichungen gleich gesetzt und über den gesamten Phasenraum integriert werden. Dabei gilt die Forderung [1]

$$c^*(\vec{r}, E', E, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) \cdot \tau^*(\vec{r}', \vec{r}, E', \vec{\Omega}') = c(\vec{r}, E, E', \vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \cdot \tau(\vec{r}, \vec{r}', E', \vec{\Omega}'). \quad (6)$$

Hierbei zeigt sich ein weiterer Vorteil adjungierten Strahlungstransports. Wenn in einer Simulation für eine gegebene Geometrie das Ergebnis I für unterschiedliche fixe Quellen berechnet werden soll, so muss mittels adjungierte Simulation der Teilchenwert $\zeta_{E\Omega}^*$ nur einmal berechnet werden. Da die Quelle durch $s_{E\Omega}$ beschrieben wird, ergibt sich das Ergebnis für eine andere Quelle durch Ersetzen von $s_{E\Omega}$ in (5). Bei vorwärts gerichteter Simulation muss das Ergebnis für jede Quelle extra berechnet werden.

3 Literatur

- [1] I. LUX, L. KOBLINGER: „Monte Carlo particle transport methods: neutron and photon calculations“. CRC Press, 1991.
- [2] L.L. CARTER, E.D. CASHWELL, U.S.E.R. AND D.A.D. OF M. APPLICATION: „Particle transport simulation with the Monte Carlo method“. Technical Information Center, Office of Public Affairs, U.S. Energy Research and Development Administration, 1975.
- [3] T.E. BOOTH, H.G. HUGHES, A. ZUKAITIS, F.B. BROWN, R.D. MOSTELLER, M. BOGGS, J.S. BULL, R.E. PRAEL, R. MARTZ, R.A. FORSTER, A. SOOD, J.T. GOORLEY, J.E. SWEEZY: „MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory“. Los Alamos National Laboratory, 2003.
- [4] T.E. BOOTH, J.S. HENDRICKS: „Importance Estimation In Forward Monte-carlo Calculations“, Nucl. Technol.-Fusion, 5 (1), 90–100, 1984.
- [5] R.R. COVEYOU, V.R. CAIN, K.J. YOST: „Adjoint and Importance In Monte Carlo Application“, Nucl. Sci. Eng., 27 (2), 219–234, 1967.
- [6] D. IRVING: „Adjoint Boltzmann Equation and Its Simulation by Monte-Carlo“, Nucl. Eng. Des., 15 (3), 273-, 1971.
- [7] D. GABLER: „Implementierung des adjungierten Teilchentransports in nichtanaloge Monte-Carlo-Algorithmen“. Diplomarbeit, TU Dresden, 2005.
- [8] LOS ALAMOS MONTE CARLO GROUP: „MCNP: A General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport“. Los Alamos National Laboratory, 1981.

Anhang D: Berechnung des Teilchenwerts vereinigter Zellen

Inhalt

1	Herleitung	2
2	Verallgemeinerung	5
3	Literatur	6

1 Herleitung anhand eines Beispiels

Die Berechnung des Teilchenwerts vereinigter Zellen wird im Folgenden abgeleitet. Um das richtige Ergebnis zu erhalten, muss beachtet werden, in welche der Subzellen das Teilchen in die vereinigte Zelle eingetreten ist. Dies soll anhand eines Beispiels verdeutlicht werden, welches in der folgenden Abbildung 1 dargestellt ist. Betrachtet wird dabei die Vereinigung von Zellen $\Delta V_3 \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ innerhalb des Raumbereichs ΔV_3 . Quellteilchen sind hierbei Photonen oder Neutronen.

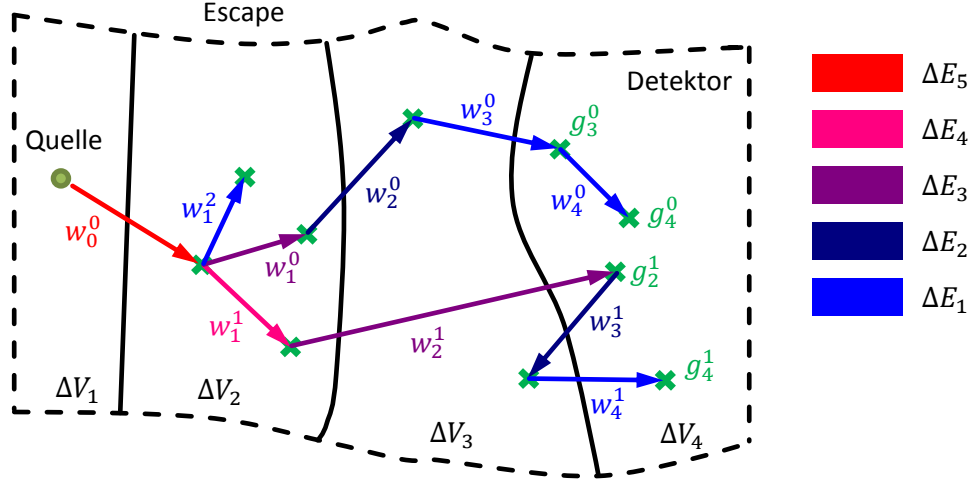


Abbildung 1: Teilchengewichte w_i^p und Detektorbeiträge g_i^p der i -ten Streuordnung und der p -ten Sekundärteilchen-Teillebensgeschichte zur Berechnung des Teilchenwerts $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ für alle Raumbereiche $\Delta V_1 \dots \Delta V_4$ und alle Energieintervalle $\Delta E_1 \dots \Delta E_5$ beispielhaft anhand der Lebensgeschichte

Für den Raumbereich ΔV_3 folgt für die Teilchengewichte W_k der erstmalig in die Zelle eintretenden Teilchen und deren zukünftige Detektorbeiträgen F_k bezüglich der k -ten Lebensgeschichte

$$\begin{aligned}
 F_k(\Delta V_3, \Delta E_1) &= F_k(\Delta V_3, \Delta E_2) = g_3^0 + g_4^0 + g_4^1, \\
 F_k(\Delta V_3, \Delta E_3) &= g_2^1 + g_4^1, \\
 F_k(\Delta V_3, \Delta E_4) &= F_k(\Delta V_3, \Delta E_5) = 0, \\
 W_k(\Delta V_3, \Delta E_1) &= w_3^0 + w_4^1, \\
 W_k(\Delta V_3, \Delta E_2) &= w_2^0 + w_3^1, \\
 W_k(\Delta V_3, \Delta E_3) &= w_2^1, \\
 W_k(\Delta V_3, \Delta E_4) &= W_k(\Delta V_3, \Delta E_5) = 0
 \end{aligned} \tag{1}$$

Für die Energieintervalle ΔE_4 und ΔE_5 sind sowohl W_k und F_k gleich null. Diese Werte seien jedoch noch nicht signifikant. Daher müssen diese Zellen folglich mit anderen vereinigt werden.

Beispielsweise gilt für die vereinigte Zelle $\Delta V_3 \times [E_1, E_5 + \Delta E_5]$ der Energieintervalle ΔE_1 bis ΔE_5 nach Abbildung 1

$$\begin{aligned} F_k(\Delta V_3, \Delta E_1 \dots E_5) &= g_3^0 + g_4^0 + g_2^1 + g_4^1, \\ W_k(\Delta V_3, \Delta E_1 \dots E_5) &= w_2^0 + w_2^1. \end{aligned} \quad (2)$$

Während alle Beiträge g_3^0 , g_4^0 , g_2^1 und g_4^1 zu berücksichtigen sind, haben die Teilchengewichte w_3^0 , w_3^1 und w_4^1 für die vereinigte Zelle keine Bedeutung. Diese sind erst durch Wechselwirkungen innerhalb des Raumbereichs ΔV_3 entstanden. Nur w_2^0 und w_2^1 sind Gewichte von Teilchen, welche die vereinigten Zelle erstmalig betreten haben.

In einem anderen Beispiel soll die vereinigte Zelle $\Delta V_3 \times [E_1, E_2 + \Delta E_2]$ der Energieintervalle ΔE_1 und ΔE_2 betrachtet werden. Mit Hilfe von Abbildung 1 kann für Teilchengewicht und Beitrag

$$\begin{aligned} F_k(\Delta V_3, \Delta E_1 \dots E_2) &= g_3^0 + g_4^0 + g_4^1, \\ W_k(\Delta V_3, \Delta E_1 \dots E_2) &= w_2^0 + w_3^1. \end{aligned} \quad (3)$$

ermittelt werden. Der Beitrag g_2^1 gehört zu einer höheren Energiegruppe und darf nicht berücksichtigt werden. Die Gewichte w_3^0 und w_4^1 gehören zwar zur Energiegruppe ΔE_1 , sind jedoch erst innerhalb der vereinigte Zelle $\Delta V_3 \times [E_1, E_2 + \Delta E_2]$ entstanden. Nur w_2^0 und w_3^1 sind Gewichte von Teilchen, welche $\Delta V_3 \times [E_1, E_2 + \Delta E_2]$ erstmalig betreten haben.

Um die Gleichungen (2) aus (1) bzw. (3) aus (1) abzuleiten, müsste demnach bei jedem erstmaligen betreten einer jeden Zelle $\Delta V_3 \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ eine zusätzliche Information gespeichert werden. Diese beinhaltet, ob das zugehörige Teilchen schon einmal in den betrachtete vereinigte Zelle $\Delta V_3 \times [E_{g'}, E_{g'} + \Delta E_{g'}]$ mit $g' < g$ eingetreten ist.

Um dies umzusetzen, werden zwei neue Größen definiert. $W_k(\Delta V_3, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g)$ ist die Summe aller Gewichte von Teilchen, die in die Zelle $\Delta V_3 \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ erstmalig eintreten, sich jedoch in ihrer vergangenen Lebensgeschichte bereits in der Zelle $\Delta V_3 \times [E_{g'}, E_{g'} + \Delta E_{g'}]$ mit $g' \neq g$ befanden. $g' = g$ gilt, wenn das Teilchen erstmalig den Raumbereich ΔV_3 betritt. Entsprechend dieser Notation werden die dazugehörigen zukünftigen Beiträge in $F_k(\Delta V_3, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g)$ gesammelt.

Für den Raumbereich ΔV_3 aus dem Beispiel aus Abbildung 1 gilt dann für alle $F_k(\Delta V_3, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g)$ und $W_k(\Delta V_3, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g)$ größer Null

$$\begin{aligned}
 F_k(\Delta V_3, \Delta E_2 \rightarrow \Delta E_2) &= g_3^0 + g_4^0, \\
 F_k(\Delta V_3, \Delta E_3 \rightarrow \Delta E_3) &= g_4^1 + g_2^1, \\
 F_k(\Delta V_3, \Delta E_2 \rightarrow \Delta E_1) &= g_3^0 + g_4^0 + g_4^1, \\
 F_k(\Delta V_3, \Delta E_3 \rightarrow \Delta E_2) &= g_4^1,
 \end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
 W_k(\Delta V_3, \Delta E_2 \rightarrow \Delta E_2) &= w_2^0, \\
 W_k(\Delta V_3, \Delta E_3 \rightarrow \Delta E_3) &= w_2^1, \\
 W_k(\Delta V_3, \Delta E_2 \rightarrow \Delta E_1) &= w_3^0 + w_4^1, \\
 W_k(\Delta V_3, \Delta E_3 \rightarrow \Delta E_2) &= w_3^1.
 \end{aligned}$$

Damit folgt

$$F_k(\Delta V_3, \Delta E_g) = \sum_{g'=1}^5 F_k(\Delta V_3, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g) \tag{5}$$

und

$$W_k(\Delta V_3, \Delta E_g) = \sum_{g'=1}^5 W_k(\Delta V_3, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g). \tag{6}$$

Um mit diesen Größen die Summe der Teilchengewichte und der zukünftigen Beiträge für die vereinigte Zelle $\Delta V_3 \times [E_1, E_5 + \Delta E_5]$ aus Gleichung (2) zu erhalten, muss

$$\begin{aligned}
 F_k(\Delta V_3, \Delta E_1 \dots \Delta E_5) &= \sum_{g=1}^G F_k(\Delta V_3, \Delta E_g \rightarrow \Delta E_g) \\
 &= F_k(\Delta V_3, \Delta E_2 \rightarrow \Delta E_2) + F_k(\Delta V_3, \Delta E_3 \rightarrow \Delta E_3),
 \end{aligned} \tag{7}$$

$$\begin{aligned}
 W_k(\Delta V_3, \Delta E_1 \dots \Delta E_5) &= \sum_{g=1}^G W_k(\Delta V_3, \Delta E_g \rightarrow \Delta E_g) \\
 &= W_k(\Delta V_3, \Delta E_2 \rightarrow \Delta E_2) + W_k(\Delta V_3, \Delta E_3 \rightarrow \Delta E_3)
 \end{aligned}$$

berechnet werden.

Für die vereinigte Zelle $\Delta V_3 \times [E_1, E_2 + \Delta E_2]$ folgt die Gleichung (3) hingegen aus

$$\begin{aligned}
 F_k(\Delta V_3, \Delta E_1 \dots \Delta E_2) &= \sum_{g=1}^2 F_k(\Delta V_3, \Delta E_g \rightarrow \Delta E_g) \\
 &\quad + \sum_{g=3}^5 (F_k(\Delta V_3, \Delta E_g \rightarrow \Delta E_1) + F_k(\Delta V_3, \Delta E_g \rightarrow \Delta E_2)) \\
 &= F_k(\Delta V_3, \Delta E_2 \rightarrow \Delta E_2) + F_k(\Delta V_3, \Delta E_3 \rightarrow \Delta E_2) \\
 &= \sum_{i=1}^2 \sum_{g=1}^5 F_k(\Delta V_3, \Delta E_g \rightarrow \Delta E_i) \\
 &\quad - \sum_{i=1}^2 \sum_{g=i+1}^2 F_k(\Delta V_3, \Delta E_g \rightarrow \Delta E_i) \\
 & \\
 W_k(\Delta V_3, \Delta E_1 \dots \Delta E_2) &= \sum_{i=1}^2 \sum_{g=1}^5 W_k(\Delta V_3, \Delta E_g \rightarrow \Delta E_i) \\
 &\quad - \sum_{i=1}^2 \sum_{g=i+1}^2 W_k(\Delta V_3, \Delta E_g \rightarrow \Delta E_i) \\
 &= W_k(\Delta V_3, \Delta E_2 \rightarrow \Delta E_2) + W_k(\Delta V_3, \Delta E_3 \rightarrow \Delta E_2).
 \end{aligned} \tag{8}$$

2 Verallgemeinerung

Aus den Gleichungen (7) und (8) lässt sich eine allgemeine Vorschrift für die Berechnung der Summe der Teilchengewichte $W_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots E_j)$ und der zukünftigen Beiträge $F_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots E_j)$ benachbarter vereinigter Zellen innerhalb eines Raumbereichs ΔV_m ableiten. Es gilt

$$\begin{aligned}
 F_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j) &= \sum_{g=i}^j \sum_{g'=1}^G F_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_i) \\
 &\quad - \sum_{\substack{g, g'=i \\ g \neq g'}}^j F_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g), \\
 & \\
 W_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j) &= \sum_{g=i}^j \sum_{g'=1}^G W_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_i) \\
 &\quad - \sum_{\substack{g, g'=i \\ g \neq g'}}^j W_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g).
 \end{aligned} \tag{9}$$

Für den Teilchenwert $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)$ folgt entsprechend

$$\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g) = \frac{F(\Delta V_m, \Delta E_g)}{W(\Delta V_m, \Delta E_g)} \quad (10)$$

die Beziehung

$$\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j) = \frac{\sum_{k=1}^N F_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)}{\sum_{k=1}^N W_k(\Delta V_m, \Delta E_i \dots \Delta E_j)} \quad (11)$$

mittels Summation über alle N Lebensgeschichten.

Da für Photonen keine Wechselwirkung existiert, bei der die Energie vergrößert wird, sind alle Summanden $W_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g)$ und $F_k(\Delta V_m, \Delta E_{g'} \rightarrow \Delta E_g)$ mit $g' < g$ immer null und müssen nicht berücksichtigt werden. Gleichung (9) vereinfacht sich dann entsprechend. Bei Neutronen hingegen sorgen insbesondere Stöße im thermischen Energiebereich für eine Vergrößerung der Energie langsamer Neutronen [44]. In diesem Fall müssen alle Energiegruppenwechsel berücksichtigt werden.

3 Literatur

- [1] W. STOLZ: „Radioaktivität: Grundlagen - Messung - Anwendungen“. Wiesbaden: Teubner, 2005.
- [2] W.A. COLEMAN: „Mathematical Verification of A Certain Monte Carlo Sampling Technique and Applications of Technique To Radiation Transport Problems“, Nucl. Sci. Eng., 32 (1), 76–, 1968.
- [3] T.E. BOOTH, H.G. HUGHES, A. ZUKAITIS, F.B. BROWN, R.D. MOSTELLER, M. BOGGS, J.S. BULL, R.E. PRAEL, R. MARTZ, R.A. FORSTER, A. SOOD, J.T. GOORLEY, J.E. SWEETZ: „MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory“. Los Alamos National Laboratory, 2003.
- [4] H. KRIEGER: „Grundlagen der Strahlungsphysik und des Strahlenschutzes“. Springer Science & Business Media, 2012.
- [5] F.S. GAVALDÀ, J.M.F. VAREA, J.S. ROMA, O. DE C. I D. ECONÒMIC: „PENELOPE 2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport : Workshop Proceedings, Barcelona, Spain 30 June-3 July 2008“. OECD, 2009.
- [6] T.E. BOOTH: „Monte-Carlo Variance Reduction Approaches for Non-Boltzmann Tallies“, Los Alamos Natl. Lab. Rep., (LA-12433), 1992.
- [7] T.E. BOOTH: „Pulse Height Tally Variance Reduction in MCNP“, Los Alamos Natl. Lab. Rep., (LA-13955), 2004.
- [8] T.E. BOOTH, J.S. HENDRICKS: „Importance Estimation In Forward Monte-carlo Calculations“, Nucl. Technol.-Fusion, 5 (1), 90–100, 1984.

Anhang E: In AMOS implementierte Algorithmen

Inhalt

1	Photonentransport	2
2	Monte Carlo Detektoren	6
3	Gewichtsfenstertechnik	10
4	Gewichtsfenstergenerator	16
5	Literatur	19

1 Photonentransport

Mit Hilfe des Strahlungstransportprogramms AMOS ist es möglich, die Photonenfluenz und die Impulshöhenverteilung in einem Detektorgebiet für stationäre Probleme zu schätzen. Der implementierte Photonentransportalgorithmus ist in Abbildung 1 dargestellt. Dieser bezieht sich auf die nicht-analogen Simulation der Lebensgeschichte eines Primärphotons unter Verwendung der impliziten Absorption.

Begonnen wird mit dem Transportprozess zur Bestimmung des nächsten Wechselwirkungsorts \vec{r}_{i+1} zur Streuordnung $i + 1$. Anschließend erfolgt der Stoßprozess. Dazu gehört die Berechnung des neuen Teilchengewichts über die Nichtabsorptionswahrscheinlichkeit $P_{\text{NA}}^k(\vec{r}_{i+1}, E_i)$ der Teilchenenergie E_i für das Nuklid k am Ort \vec{r}_{i+1} ,

$$w_{i+1} = w_i \cdot P_{\text{NA}}^k(\vec{r}_{i+1}, E_i). \quad (1)$$

Diese bezieht sich jedoch nur auf die Wahrscheinlichkeit, dass ein Photoeffekt stattfindet. Da AMOS speziell für Problemstellungen im Photonenenergiebereich bis zu wenigen MeV entwickelt wird, ist die Wahrscheinlichkeit für Paarbildung in den meisten Fällen null oder nur sehr gering. Daher wird die Absorption durch Paarbildung neben kohärenter und inkohärenter Streuung als möglicher nicht-analoger Stoßprozess durchgeführt. Entstehen dabei Sekundärphotonen und -elektronen, erhalten diese das Gewicht $w = w_{i+1}$ und werden nach Beendigung der Lebensgeschichte des Primärteilchens simuliert. Der Elektronentransport erfolgt in AMOS grundsätzlich analog.

Die Simulation des Photoeffekts erfolgt mittels der Gewichts Anpassung. Infolge der dabei entstehenden Vakanz können kaskadiert sowohl charakteristische Röntgenstrahlung als auch Elektronenstrahlung in Form von AUGER-Elektronen emittiert werden [1]. Alle entstehenden Sekundärteilchen erhalten das Gewicht

$$w = w_i \cdot (1 - P_{\text{NA}}^k(\vec{r}_{i+1}, E_i)) \quad (2)$$

und werden nach Beendigung der Lebensgeschichte des Primärteilchens simuliert.

Durch inkohärente Streuung wird die Energie des Primärphotons verringert, $E_{i+1} < E_i$. Aus diesem Grund wird anschließend überprüft, ob diese unterhalb einer benutzerdefinierten unteren Energieschwelle E_{min} liegt. Für $E_{i+1} < E_{\text{min}}$ gilt, dass der Beitrag zum Schätzer vernachlässigbar klein ist. Dazu gehört zum Beispiel die untere Messgrenze eines zu simulierenden Detektors. Die Schwelle ist daher von der Problemstellung abhängig. Das Primärteilchen gilt bei unterschreiten der Schwelle als absorbiert.

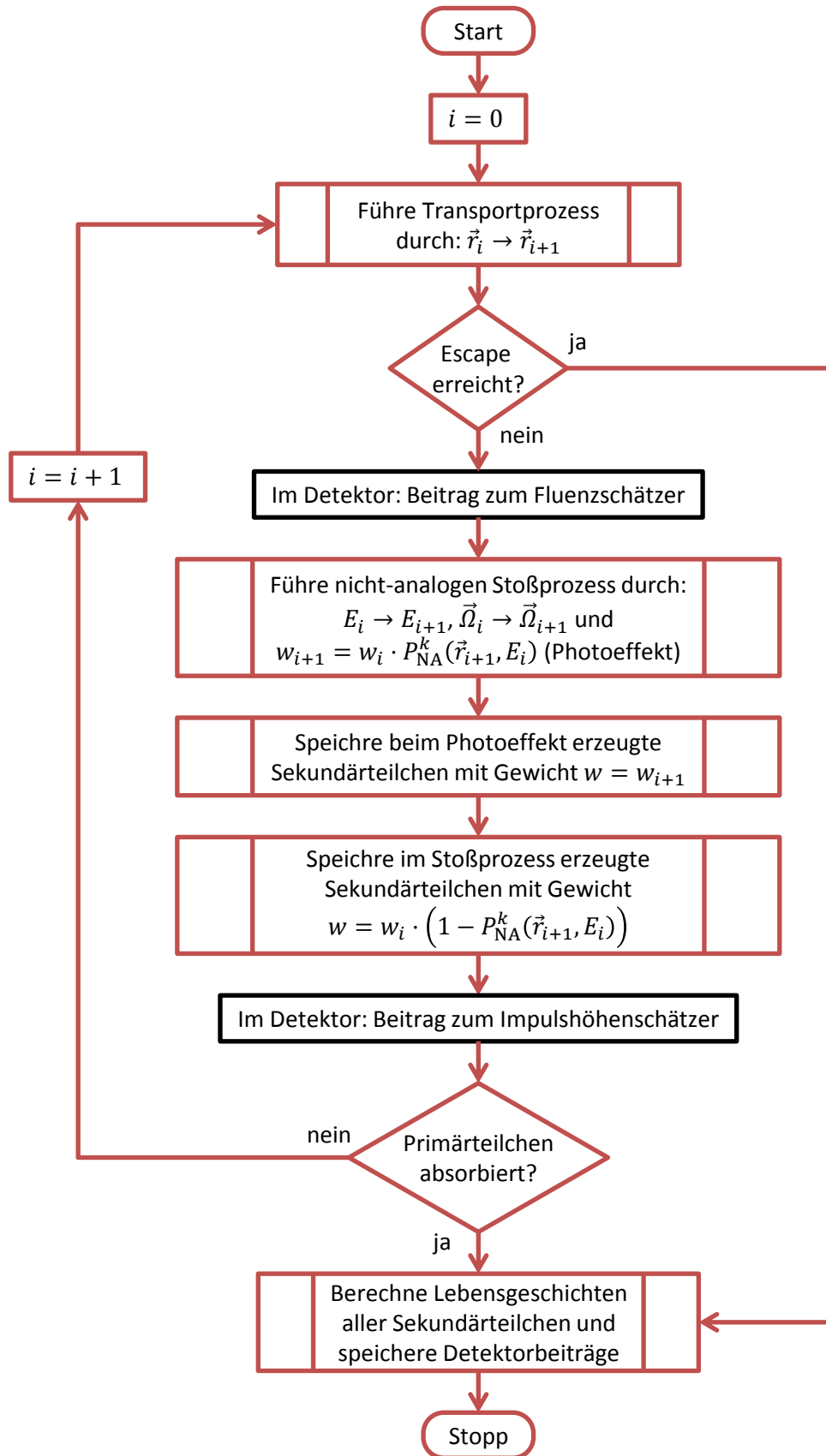


Abbildung 1: Flussdiagramm des Photonentransportalgorithmus einer Primärteilchenlebensgeschichte in AMOS

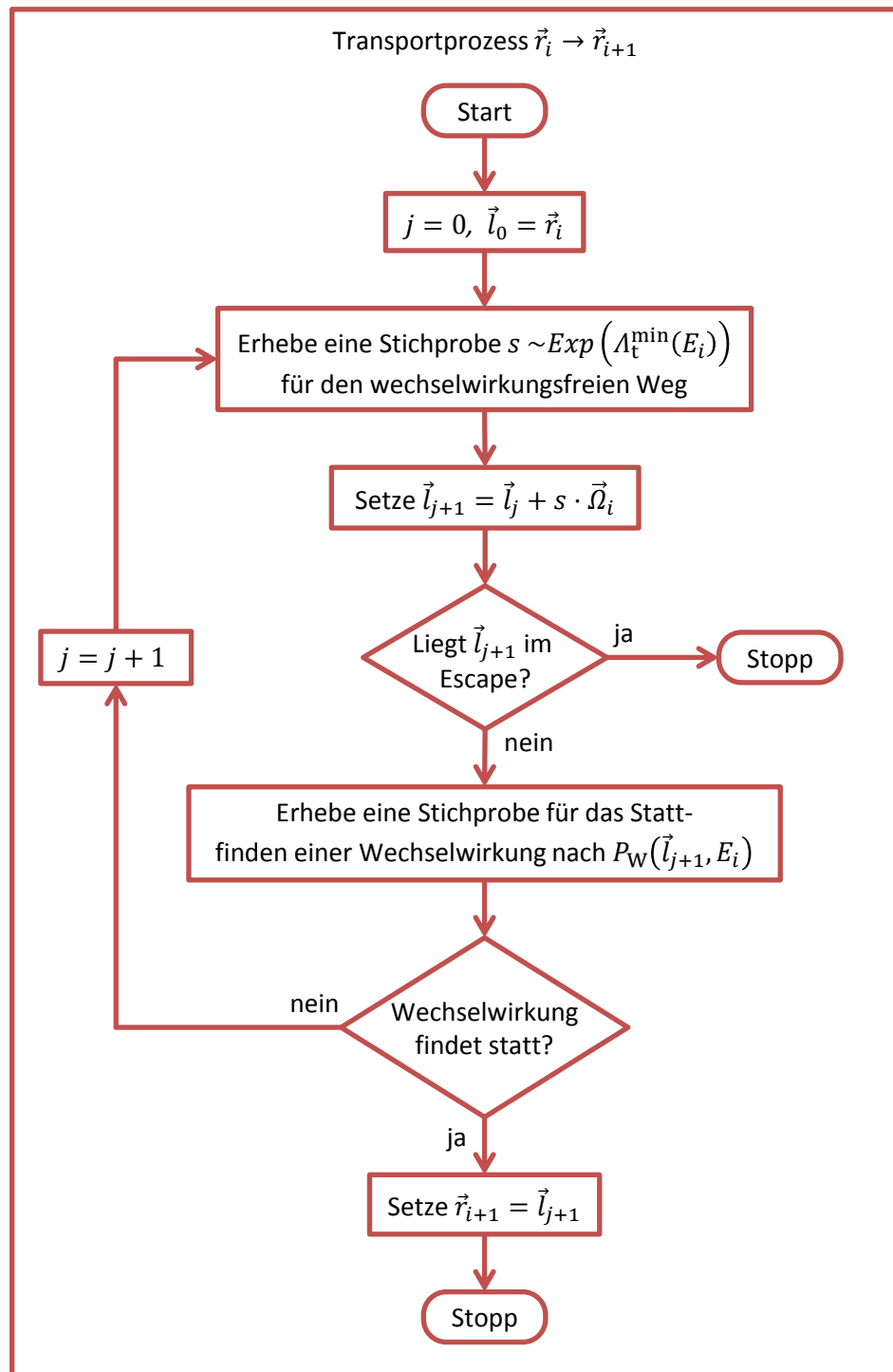


Abbildung 2: Flussdiagramm zur Berechnung einer Stichprobe für den wechselwirkungsfreien Weg für Photonen in AMOS (Transportprozess $\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{i+1}$ aus Abbildung 1)

In Abbildung 2 ist ausführlich die Berechnung einer Stichprobe für den wechselwirkungsfreien Weg dargestellt. Diese ist der Kern des Transportprozesses $\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{i+1}$. Dazu wird der aktuelle Ort \vec{r}_i zunächst auf die Ortsvariable \vec{l}_j mit $j = 0$ übertragen. Anschließend wird eine exponentialverteilte Stichprobe

$$s \sim \text{Exp}(\Lambda_t^{\min}(E_i)) \quad (3)$$

mit Parameter $\Lambda_t^{\min}(E_i)$ bestimmt. Daraus berechnet sich ein möglicher neuer Wechselwirkungsort nach

$$\vec{l}_{j+1} = \vec{l}_j + s \cdot \vec{\Omega}_i. \quad (4)$$

Anschließend wird überprüft, ob das Teilchen am Ort \vec{l}_{j+1} den Escape-Bereich erreicht hat. Dieser bezieht sich hierbei auf den unendlich ausgedehnten und vollständigen Absorber, welche die Geometrie aus der Aufgabenstellung umgibt.

Der Parameter $\Lambda_t^{\min}(E_i)$ ist die kleinste der totalen mittleren freien Weglängen aller Materialien der Geometrie zur Photonenenergie E_i . Folglich ist die mittlere Wegstrecke zwischen zwei Wechselwirkungspunkten materialunabhängig. Um diesen Fehler zu korrigieren, muss am ermittelten Ort \vec{l}_{i+1} mit Hilfe einer weiteren gleichverteilten Stichprobe bestimmt werden, ob eine Wechselwirkung tatsächlich stattfindet. Das Kriterium ist hierbei der Wechselwirkungswahrscheinlichkeit $P_W(\vec{l}_{i+1}, E_i)$, welche über

$$P_W(\vec{l}_{i+1}, E_i) = \frac{\Lambda_t^{\min}(E_i)}{\Lambda_t(\vec{l}_{i+1}, E_i)} \quad (5)$$

definiert ist. Findet eine Wechselwirkung statt, so wird $\vec{r}_{i+1} = \vec{l}_{j+1}$ gesetzt. Andernfalls muss eine weitere Schrittlänge $s_j \sim \text{Exp}(\Lambda_t^{\min}(E_i))$ bestimmt werden. Dass dadurch der mittlere freie Weg wieder exponentialverteilt und materialabhängig ist, wurde von W.A. COLEMAN in [2] bewiesen.

Der Vorteil der Verwendung der minimalen mittleren freien Weglänge $\Lambda_t^{\min}(E_i)$ ist, dass keine Durchstoßpunkte an Grenzflächen zwischen Zellen unterschiedlicher Materialien in der Geometrie berechnet werden müssen. Dadurch wird ein Großteil an Rechenzeit eingespart. Denn insbesondere die Berechnung von Schnittpunkten von Geraden mit Kugeloberflächen oder Kegelmantelflächen ist numerisch aufwendig und erfordert vergleichsweise viel Rechenzeit.

2 Monte Carlo Detektoren

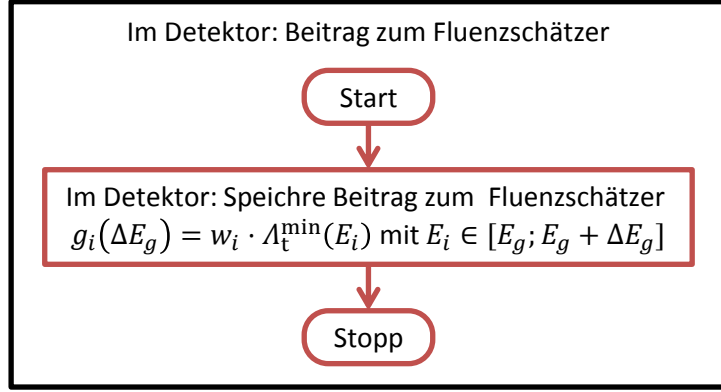


Abbildung 3: Flussdiagramm zur Berechnung des Fluenzschätzerbeitrags in AMOS

Letztendlich dient jede Lebensgeschichte zur Schätzung der Beitrag zum Monte Carlo Detektor. Je nach Detektorart erfolgt dies an unterschiedlichen Stellen im Simulationsalgorithmus (schwarz umrandete Elemente in Abbildung 1). Die Berechnung des Photonenfluenzschätzerbeitrags findet zwischen Transport- und Stoßprozess statt. Der Beitrag $g_i(\Delta E_g)$ zur Streuordnung i ist formal durch

$$g_i(\Delta E_g) = \begin{cases} w_i \cdot \lambda_t^{\min}(E_i), & \vec{r}_{i+1} \in \Delta V_D \wedge E_i \in [E_g; E_g + \Delta E_g] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (6)$$

im Energieintervall $[E_g; E_g + \Delta E_g]$ der Energiegruppe g gegeben [3]. Der Raumbereich ΔV_D bezeichnet das Detektorgebiet.

Wurde die Lebensgeschichte des k -ten Primärteilchens durch Escape oder Absorption zur Streuordnung $n(k)$ beendet, werden zunächst alle erzeugten Sekundärteilchen simuliert. Hierbei können wiederum Sekundärteilchen entstehen. Erst wenn alle Sekundärteilchen simuliert sind, wird der Gesamtbeitrag $G_{g,k}^\Phi$ der Energiegruppe g als Summe der Einzelbeiträge aller Photonen berechnet. Nach der Simulation von insgesamt N Lebensgeschichten erfolgt die Berechnung der geschätzten spektralen Photonenfluenz $\tilde{\Phi}_E^g$ und der zugehörigen Standardunsicherheit $\Delta \tilde{\Phi}_E^g$ über

$$G_{g,k}^\Phi = \frac{1}{\Delta V_D \cdot \Delta E_g} \left(\sum_{i=0}^{n(k)} g_i(\Delta E_g) + \sum_{\text{alle Sekundärteilchen}} \left[\sum_{\text{alle Streuordnungen}} g_i(\Delta E_g) \right] \right), \quad (7)$$

$$\tilde{\Phi}_E^g = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N G_{g,k}^\Phi, \quad (8)$$

$$\Delta \tilde{\Phi}_E^g = \sqrt{\frac{1}{N \cdot (N-1)} \left(\sum_{k=1}^N G_{g,k}^{\Phi^2} - \frac{1}{N} \left(\sum_{k=1}^N G_{g,k}^\Phi \right)^2 \right)}. \quad (9)$$

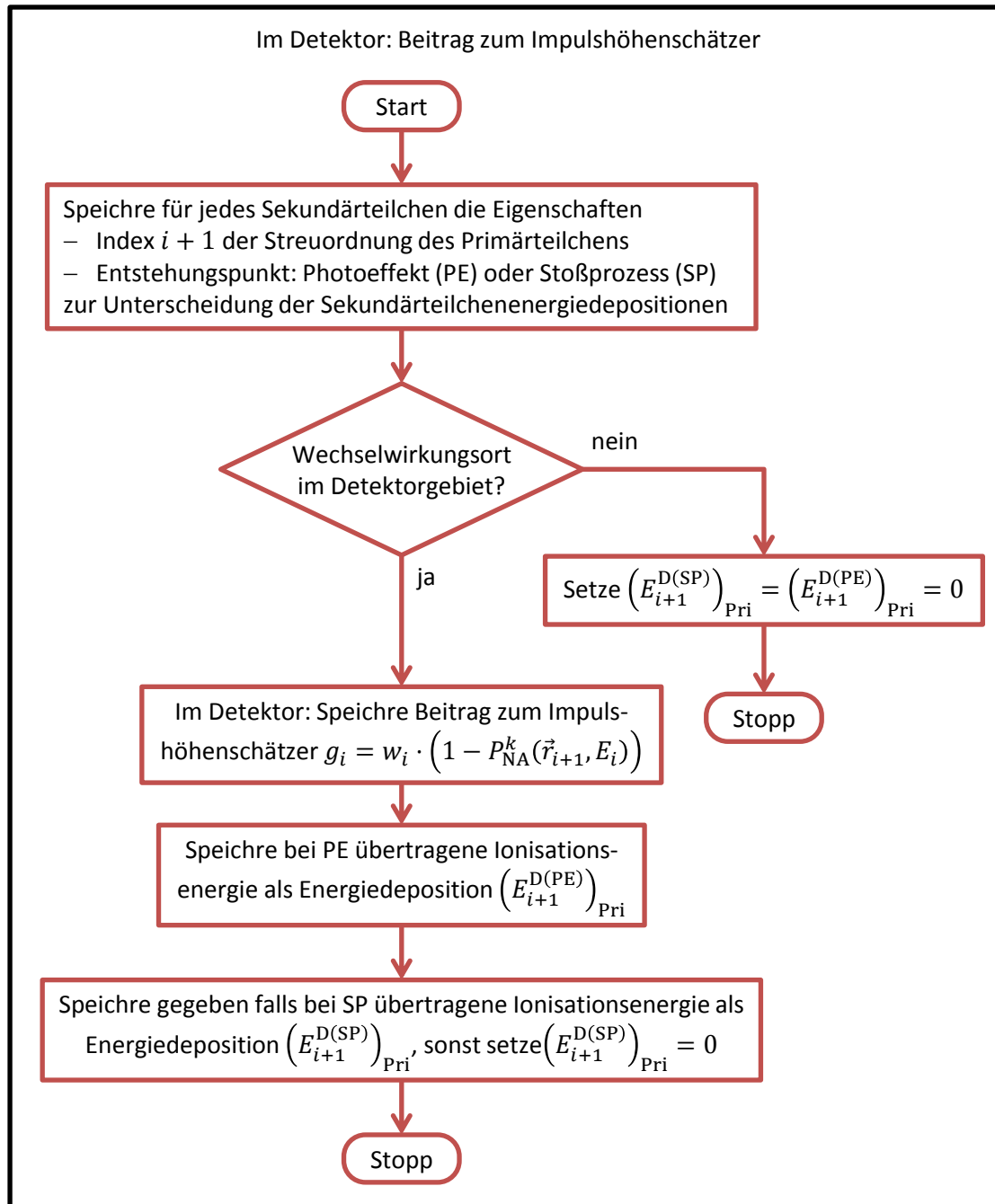


Abbildung 4: Flussdiagramm zur Berechnung des Impulshöhen­schätzerbeitrags in AMOS

Die Berechnung der Beiträge zum Impulshöhen­schätzer als nicht-BOLTZMANN'scher Schätzer ist deutlich aufwändiger. Das entsprechende Flussdiagramm ist in Abbildung 4 dargestellt. Da eine Energie­deposition nur während einer Wechselwirkung stattfindet, kann deren Detektorbetrag erst nach der Streuung bestimmt werden.

Bei nicht-analogem Photonentransport mit impliziter Absorption wird der Photoeffekt (PE) bei jedem Stoßprozess durchgeführt. Ein Teil der dabei auf das gebundene Elektron übertragenen Energie wird in Ionisationsenergie $I_B^{s,k}$ einer Schale s des Nuklids k umgewandelt und muss als Energiedeposition unter

$$\left(E_{i+1}^{D(PE)}\right)_{\text{Pri}} = I_B^{s,k} \quad (10)$$

gespeichert werden. Im Anschluss wird der eigentliche Stoßprozess (SP) durchgeführt. Hier kommt es nur bei inkohärenter Streuung zu einer weiteren Energiedeposition, da Tripletbildung im Energiebereich bis zu wenigen MeV gegenüber der Paarbildung vernachlässigt werden kann [4]. Der Wert dieser Deposition entspricht ebenfalls der Ionisationsenergie $I_B^{s',k'}$ einer Schale s' des Nuklids k' , welche im Allgemeinen nicht mit (10) übereinstimmt, und wird als

$$\left(E_{i+1}^{D(SP)}\right)_{\text{Pri}} = I_B^{s',k'} \quad (11)$$

gespeichert. Erfolgt keine Deposition, wird formal ein Wert von null zugeordnet.

Wurde beim Streuprozess die untere Energieschwelle E_{\min} unterschritten, gilt das Primärteilchen als absorbiert. Es wird von einer Deposition der gesamten Energie am Ort \vec{r}_{i+1} ausgegangen. Gehört dieser zum Detektorgebiet, so gilt

$$\left(E_{i+2}^{D(PE)}\right)_{\text{Pri}} = E_{i+1} . \quad (12)$$

Erreicht das Primärteilchen den Escape, wird formal eine Absorption ohne Energiedeposition registriert,

$$\left(E_{i+2}^{D(PE)}\right)_{\text{Pri}} = 0 . \quad (13)$$

Nach Beendigung der Lebensgeschichte des Primärphotons werden alle erzeugten Sekundärteilchen analog simuliert. Für jedes ist der Entstehungspunkt Photoeffekt oder Stoßprozess zusammen mit der dazugehörigen Streuordnung der Primärteilchenlebensgeschichte gespeichert. Sämtliche Sekundärteilchen, die dabei entstehen, werden mittels derselben Eigenschaften Entstehungspunkt und Streuordnung des Primärteilchens markiert. Dies ist notwendig, um alle Energiedepositionen durch Sekundärteilchen den Entstehungspunkten zuzuordnen. Auch hier wird allen Depositionen außerhalb des Detektors formal ein Wert von null zugeordnet.

Diese Zuordnung ist durchzuführen, da mittels impliziter Absorption bei jedem Photoeffekt die Lebensgeschichte für den Anteil

$$w = w_i \cdot \left(1 - P_{\text{NA}}^k(\vec{r}_{i+1}, E_i)\right) \quad (14)$$

des Primärteilchens beendet ist. Zu dessen Lebensgeschichte gehören sämtliche Energiedepositionen $(E_m^{D(SP)})_{\text{Pri}}$ bei bisher statt gefundenen Streuprozessen (SP) $m = 1, \dots, i$ und bei dem gerade durchgeführten Photoeffekt (PE), $(E_{i+1}^{D(PE)})_{\text{Pri}}$. Weiterhin sind die Depositionen $(E_j^D)_{\text{Sek}}$ aller bis zu dieser Streuordnung erzeugten Sekundärteilchen aller Generationen zu berücksichtigen. Bei diesen muss jedoch nicht mehr zwischen Photoeffekt- und Stoßprozessdeposition unterschieden werden, da deren Simulation zur Einsparung von Rechenzeit und Speicher immer analog erfolgt. Für die geschätzte Energiedepositionen \tilde{E}_D mit $\tilde{E}_D \in [E_D^g; E_D^g + \Delta E_D^g]$ der Energiegruppe g gilt

$$\begin{aligned} \tilde{E}_D = & (E_{i+1}^{D(PE)})_{\text{Pri}} + \sum_{\text{Pri: } i+1, \text{ PE}} (E_j^D)_{\text{Sek}} \\ & + \sum_{m=1}^i \left\{ (E_m^{D(SP)})_{\text{Pri}} + \sum_{\text{Pri: } m, \text{ SP}} (E_j^D)_{\text{Sek}} \right\} \end{aligned} \quad (15)$$

und der zugehörige Beitrag zum Impulshöhenschätzer $\tilde{\varepsilon}(\Delta E_D^g)$ beträgt

$$g_i(\Delta E_D^g) = \begin{cases} w_i \cdot (1 - P_{\text{NA}}^k(\vec{r}_{i+1}, E_i)), & \vec{r}_{i+1} \in \Delta V_D \wedge \tilde{E}_D \in [E_D^g; E_D^g + \Delta E_D^g] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (16)$$

Gleichung (15) gilt letztendlich auch für das Erreichen des Escapes oder der unteren Energieschwelle.

Die Berechnung dieser Beiträge kann folglich erst nach Beendigung der Lebensgeschichte k des Primärphotons zur Streuordnung $n(k)$ und nach der Simulation aller Sekundärteilchen erfolgen. Dabei können auch mehrere Beiträge in die gleiche Energiegruppe g fallen. Daher wird auch hier zunächst der Gesamtbeitrag $G_{g,k}^D$ einer Lebensgeschichte berechnet. Nach der Simulation von insgesamt N Lebensgeschichten erfolgt die Berechnung der geschätzten Impulshöhe $\tilde{\varepsilon}(\Delta E_D^g)$ und der dazugehörigen Standardunsicherheit $\Delta \tilde{\varepsilon}(\Delta E_D^g)$

$$G_{g,k}^D = \frac{1}{\Delta E_D^g} \sum_{i=0}^{n(k)} g_i(\Delta E_D^g), \quad (17)$$

$$\tilde{\varepsilon}(\Delta E_D^g) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N G_{g,k}^D, \quad (18)$$

$$\Delta \tilde{\varepsilon}(\Delta E_D^g) = \sqrt{\frac{1}{N \cdot (N-1)} \left(\sum_{k=1}^N G_{g,k}^D{}^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{k=1}^N G_{g,k}^D \right)^2 \right)}. \quad (19)$$

3 Gewichtsfenstertechnik

Der Algorithmus zur Umsetzung der Gewichtsfenstertechnik ist in Abbildung 5 dargestellt. Entsprechend der Energiegruppe g und des Raumbereichs ΔV_m , in dem sich das Photon gerade befindet, werden die untere und die obere Gewichtsfenstergrenzen $w_L(\Delta V_m, \Delta E_g)$ und $w_U(\Delta V_m, \Delta E_g)$ und das Überlebensgewicht $w_S(\Delta V_m, \Delta E_g)$ der Zelle $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ nachgeschlagen. Mit Hilfe des Teilchengewichts w wird anschließend entschieden, ob Russisch Roulette, $w > w_U(\Delta V_m, \Delta E_g)$, Teilchensplitting, $w < w_L(\Delta V_m, \Delta E_g)$, oder keines von beiden durchgeführt wird.

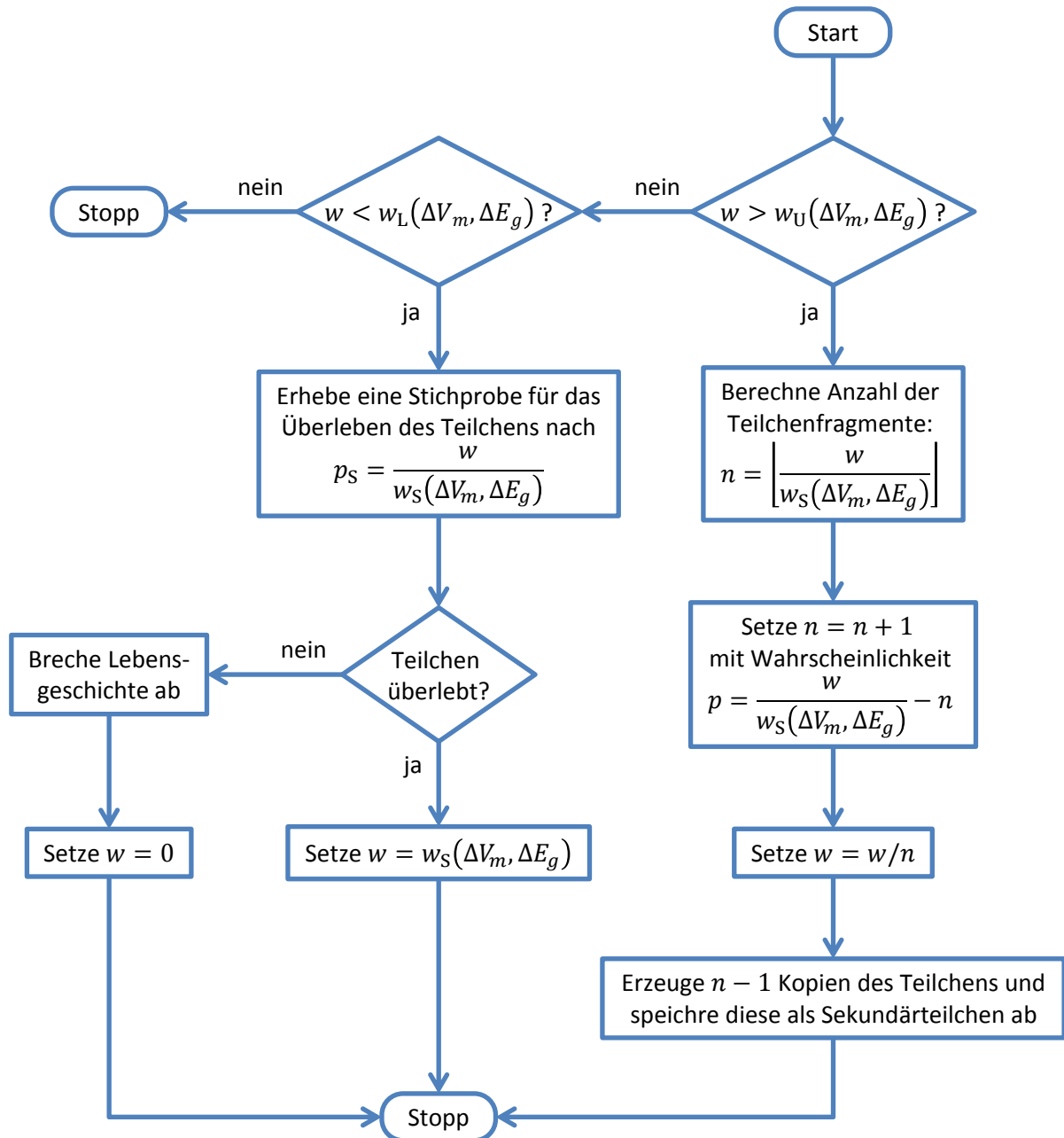


Abbildung 5: Flussdiagramm der in AMOS implementierten Gewichtsfenstertechnik

Die Gewichtsfenstertechnik muss immer dann ausgeführt werden, wenn sich das Teilchengewicht geändert hat oder das Teilchen in einer neuen Zelle eintritt. Dies umfasst die Gewichtskontrolle bei Änderung von Gewicht oder Energie und beim Betreten einer neuen Zelle.

Die erste Kontrolle erfolgt noch vor dem ersten Transportprozess. Dadurch sollen frühzeitig Sekundärteilchen erkannt werden, welche durch Sekundärprozesse wie zum Beispiel Elektronenwechselwirkungen mit unpassendem Gewicht entstanden sind.

Da beim Teilchentransport keine Durchstoßpunkte an Grenzflächen zwischen Raumbereichen der Geometrie berechnet werden, ist es möglich, dass das Teilchen unbemerkt und ohne Gewichtskontrolle durch einen oder sogar mehrere Raumbereiche hindurchtritt. Um dies zu verhindern, muss das Betreten einer neuen Zelle mit Hilfe einer speziellen Technik erkannt werden: bei der Bestimmung des wechselwirkungsfreien Wegstücks s im Transportprozess wird eine obere Schranke s_{\max} eingeführt. Dieser muss vom Benutzer so gewählt werden, dass die Wahrscheinlichkeit für das Überspringen eines Raumbereichs im Rahmen der gegebenen Problemstellung klein genug ist. Der Vorteil, Durchstoßpunkte nicht berechnen zu müssen, bleibt erhalten.

Der Algorithmus des so modifizierten Transportprozesses zur Bestimmung des nächsten Wechselwirkungspunktes ist in Abbildung 6 dargestellt. Die zusätzliche Kontrolle der Weglänge s ist durch dunkelblaue Elemente hervorgehoben. Im Fall $s > s_{\max}$ wird als möglicher neuer Wechselwirkungsort zunächst

$$\vec{l}_{j+1} = \vec{l}_j + s_{\max} \cdot \vec{\Omega}_i \quad (20)$$

gesetzt. Andernfalls gilt

$$\vec{l}_{j+1} = \vec{l}_j + s \cdot \vec{\Omega}_i. \quad (21)$$

In beiden Fällen wird anschließend überprüft, ob das Teilchen am Ort \vec{l}_{j+1} den Escape-Bereich erreicht hat. Dieser bezieht sich hierbei auf der die Geometrie umgebene, unendlich ausgedehnte vollständige Absorber.

Im nächsten Schritt erfolgt die Gewichtsfenstertechnik, sofern ein neuer Raumbereich betreten wird. Unterliegt das Teilchen dabei Russisch Roulette und überlebt nicht, so wird die Simulation der Lebensgeschichte sofort abgebrochen. Dies ist nicht explizit in Abbildung 6 aufgeführt.

Erfolgte ein Transportschritt der Wegstrecke s_{\max} , wird im Anschluss der Index j um eins erhöht und es muss eine weitere Schrittlänge $s \sim \text{Exp}\left(\Lambda_t^{\min}(E_i)\right)$ ermittelt werden. Dies wird solange wiederholt, bis der Fall $s \leq s_{\max}$ vorliegt. Erst dann wird eine gleichverteilte Stichprobe für das Stattfinden einer Wechselwirkung nach $P_W(\vec{l}_{j+1}, E_i)$ aus Gleichung (5) erhoben. Die auf diese Weise ermittelte Wegstrecke $\vec{r}_i \rightarrow \vec{l}_{j+1}$ ist wieder exponentialverteilt, was in [5] bewiesen wird.

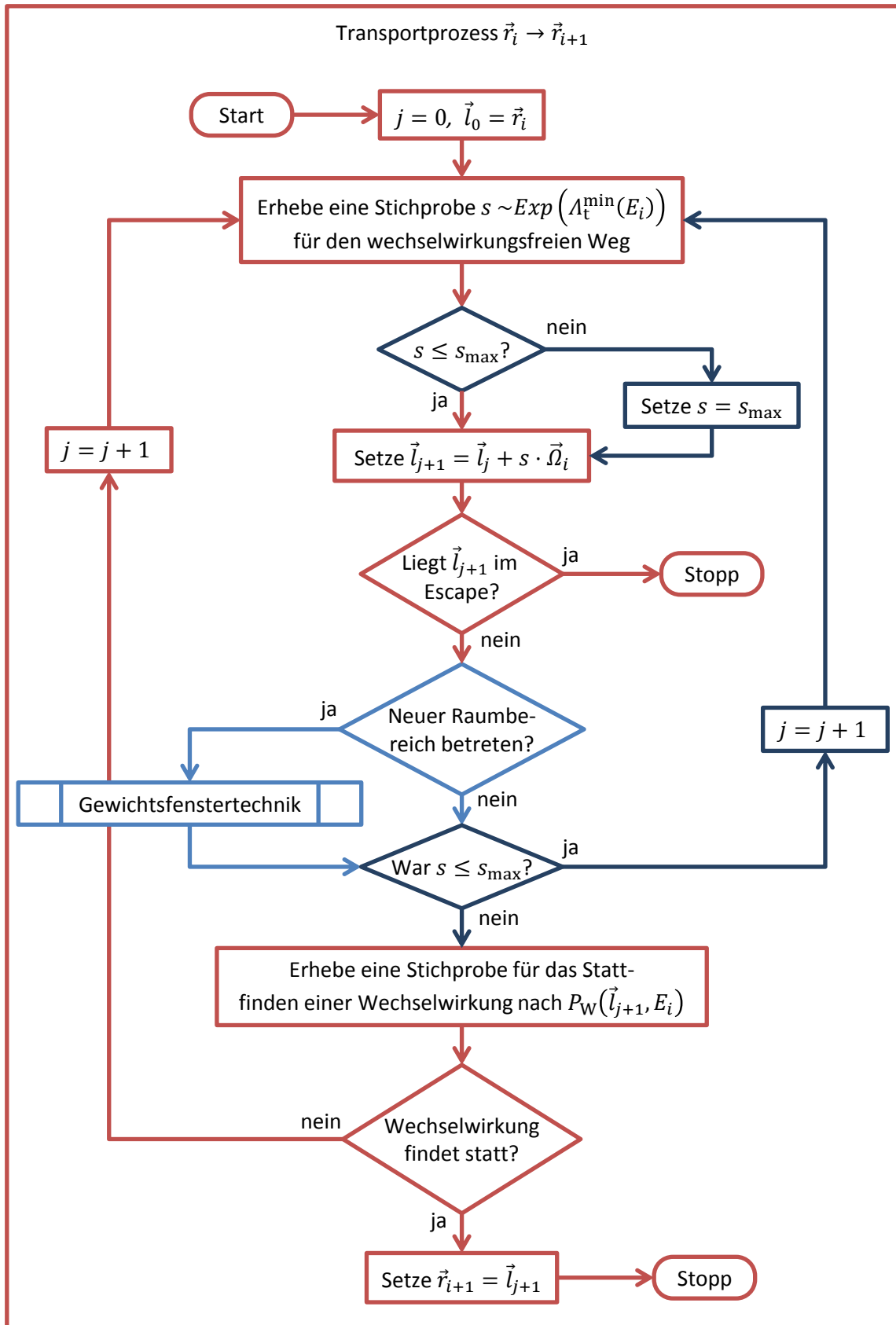


Abbildung 6: Flussdiagramm zur Berechnung einer Stichprobe für den wechselwirkungsfreien Weg für Photonen in AMOS mit zusätzlich implementierter oberer Schranke eines Wegteilstücks und der Gewichtsfenstertechnik

Die Implementation der Gewichtsfenster-technik im nicht-analogen Stoßprozess ist in Abbildung 7 dargestellt. Zunächst wird das Teilchengewicht mit der Nichtabsorptionswahrscheinlichkeit über implizite Absorption (Photoeffekt) verringert. Gleichzeitig erfolgt die Aufteilung in Primäranteil und absorbierten Anteil. Beide Teile müssen auf Grund der Gewichtsänderung durch die Gewichtsfenster-technik kontrolliert werden.

Sollte der absorbierte Teil Russisch Roulette nicht überleben, so wird kein Photoeffekt simuliert. Im Falle von Teilchensplitting muss für jedes Fragment der Photoeffekt durchgeführt werden. Die dabei entstehenden Sekundärteilchen und Energiedepositionen werden den jeweiligen Fragmenten zugeordnet. Dies gilt insbesondere für eine Anzahl an Fragmenten von eins.

Anschließend wird das gewichtsreduzierte Primärteilchen kontrolliert. Erfolgreiches Russisch Roulette führt zur Beendigung der Lebensgeschichte, wobei das Teilchen formal als absorbiert ohne Energiedeposition betrachtet wird. Bei Teilchensplitting und bei erfolgreicher Kontrolle (Anzahl an Fragment ist eins) wird für alle Fragmente der Stoßprozess simuliert. Eingangsenergie E_i und -richtung $\vec{\Omega}_i$ sind für alle gleich. Ausgangsenergie E_{i+1}^j und -richtung $\vec{\Omega}_{i+1}^j$ eines Fragments j hängen jedoch von der jeweils ausgelosten Wechselwirkungsart ab. Die erzeugten Sekundärteilchen und Energiedepositionen werden auch hier den jeweiligen Fragmenten zugeordnet. Im Falle einer Absorption ist die Lebensgeschichte des Fragments beendet und es wird nicht zur späteren Simulation abgespeichert. Dies gilt insbesondere für das Primärteilchen. Da jedes nicht-absorbierte Fragment nach der Streuung eine neue Energie erhalten kann, muss es an dieser Stelle nochmals kontrolliert werden.

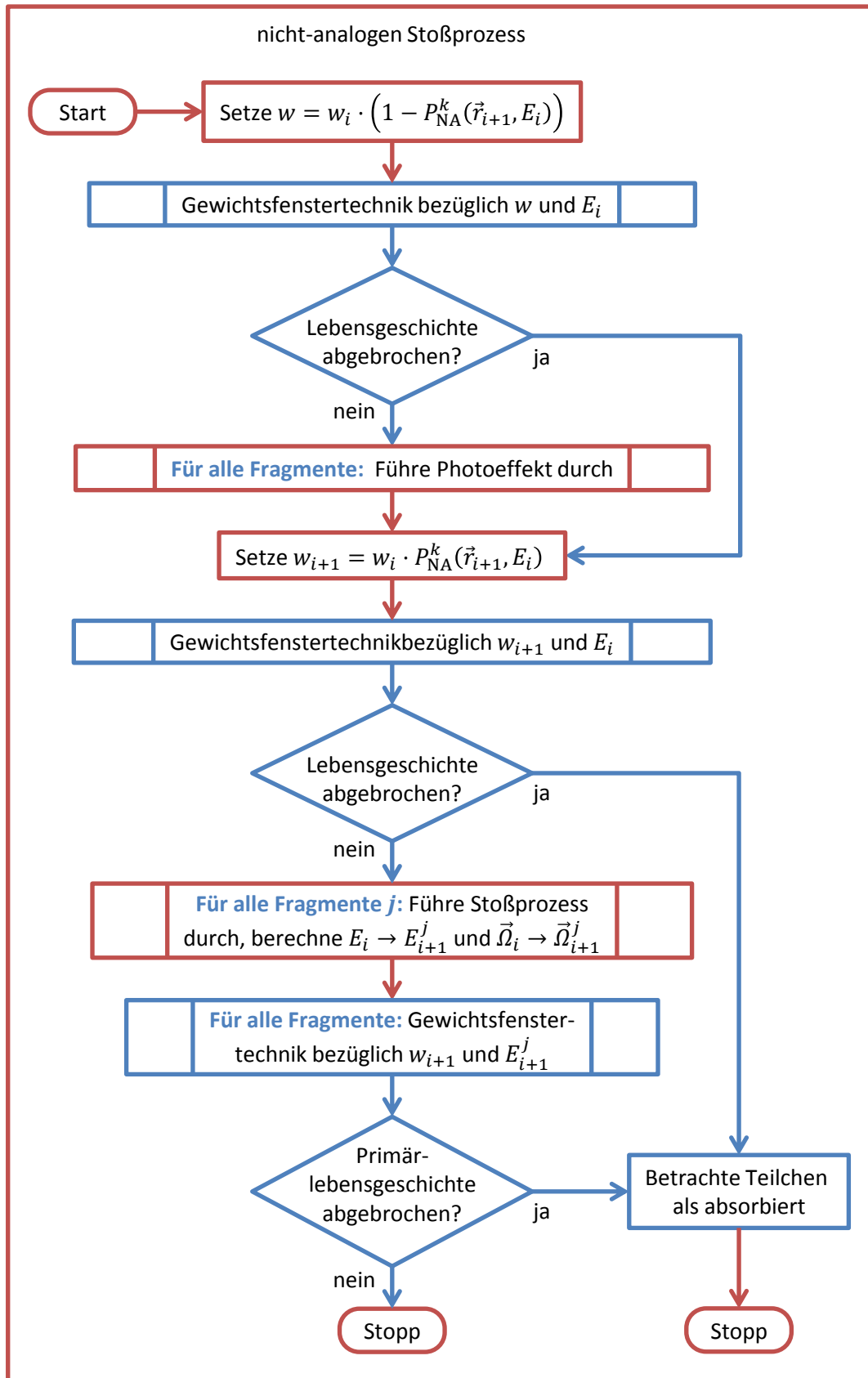


Abbildung 7: Flussdiagramm des nicht-analogen Stoßprozesses mit Gewichtsfenstertechnik

Ist der nicht-analoge Stoßprozess abgeschlossen, werden alle Energiedepositionen als Beiträge zum Impulshöhenestimator gespeichert. Die Berechnung der geschätzten Impulshöhenverteilung nach Beendigung der Lebensgeschichte muss jedoch an die Verwendung der Gewichtsfenstertechnik angepasst werden. Während erfolgreiches Russisch Roulette formal als Absorption ohne Energiedeposition behandelt werden kann, führt die Erzeugung von Sekundärteilchen bei Teilchensplitting zu einer Überschätzung der Energiedeposition.

Um dieses Problem zu lösen, existieren mehrere Algorithmen [6]. In AMOS ist die Dekonvolutionsmethode nach T.E. BOOTH implementiert, welche ausführlich in [6] und [7] dargestellt ist. Der Vorteil dieser Methode gegenüber den Ansätzen Supertrackmethode und Methode des korrigierten Einzelteilchens ist, dass der Transportalgorithmus nicht verändert werden muss und kein zusätzlicher benutzerdefinierter Parameter die Effizienz beeinflussen kann.

Alle Fragmente werden zunächst als Sekundärteilchen gespeichert, jedoch bei der Berechnung des Beitrags zum Impulshöhenestimator als eine mögliche Fortsetzung der Lebensgeschichte des Primärteilchens betrachtet. Dies ist in Abbildung 8 veranschaulicht. Auch alle erzeugten Sekundärteilchen werden den jeweiligen Strängen zugeordnet. Dadurch entsteht formal eine Vielzahl möglicher Realisierungen der Primärlebensgeschichte. Für jede Realisierung können anschließend alle Energiedepositionen entsprechend Gleichung (15) saldiert werden. Die auf diese Weise mit der Dekonvolutionsmethode geschätzte Impulshöhenverteilung ist erwartungstreu [6]

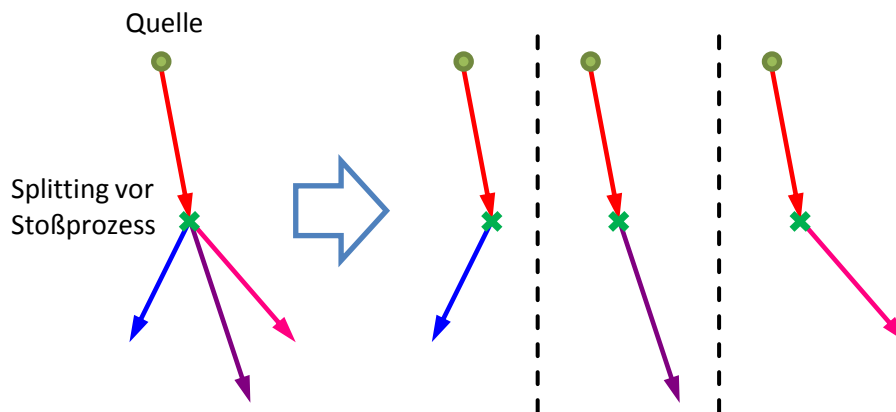


Abbildung 8: Veranschaulichung der Dekonvolutionsmethode

Die Lebensgeschichten aller Fragmente werden ebenfalls nicht-analog simuliert. Dadurch erhöht sich jedoch der Speicherbedarf. Für jedes Sekundärteilchen muss neben Entstehungspunkt (Photoeffekt oder Stoßprozess, Abbildung 4) und zugehöriger Streuordnungsindex des Primärteilchens noch gespeichert werden, von welchem Fragment es erzeugt wurde. Damit steigt auch die zur Beitragsberechnung benötigte Rechenzeit.

4 Gewichtsfenstergenerator

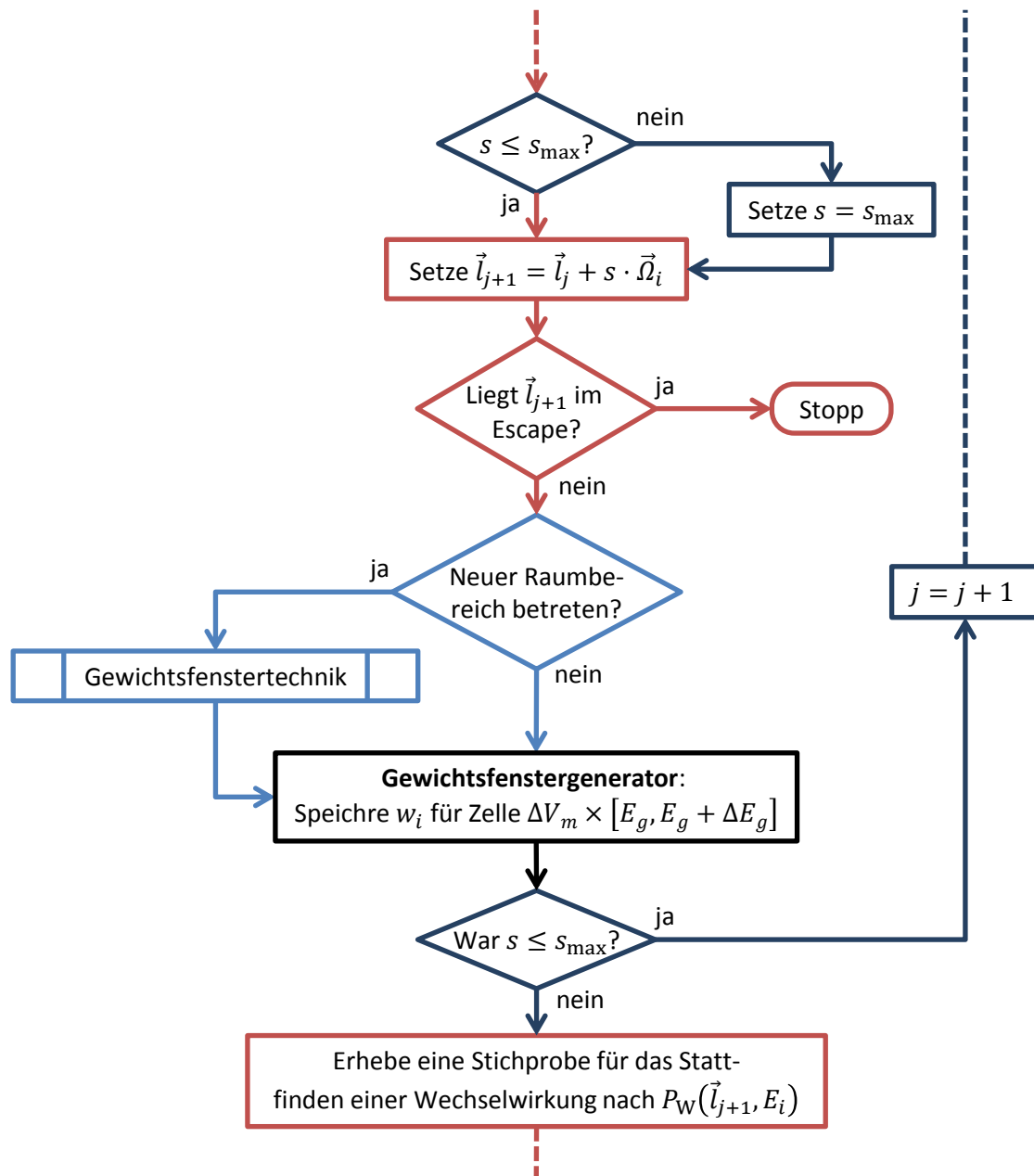


Abbildung 9: Ausschnitt des Flussdiagramms zur Berechnung einer Stichprobe für den wechselwirkungsfreien Weg für Photonen mit zusätzlich implementierter oberer Schranke eines Wegteilstücks, zusammen mit der Gewichtsfenstertechnik und dem Gewichtsfenstergenerator

Zur Realisierung des iterativen vorwärts-adjungierten Gewichtsfenstergenerators ist ein weiterer Monte Carlo Detektor implementiert. Das Ziel ist die Schätzung des Teilchenwerts $\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)$ einer Zellen $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ bezüglich des Raumbereichs ΔV_m und des Energieintervalls ΔE_g .

Nach T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS gilt [8]

$$\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g) = \frac{\text{Summe aller zukünftigen Beiträge} \\ \text{der in } \Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g] \text{ eintretende Teilchen}}{\text{Summe aller Teilchengewichte} \\ \text{der in } \Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g] \text{ eintretende Teilchen}}. \quad (22)$$

Zur Berechnung des Teilchenwerts werden die einzelnen Beiträge zum Impulshöhenschätzer oder zum Photonenfluenzschätzer einer jeden Lebensgeschichte analysiert und den jeweiligen Zellen $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ zugeordnet. Außerdem wird beginnend bei der Quellemission aufgezeichnet, in welche Zellen das Teilchen mit welchem Gewicht eingetreten ist. Dies erfolgt im Transportprozess nach der Berechnung des möglichen Wechselwirkungsorts \vec{l}_{i+1} . Der dazugehörige Algorithmus ist in Abbildung 9 dargestellt.

Mit Hilfe der entsprechend gewählten größtmöglichen wechselwirkungsfreien Wegstrecke s_{\max} wird sichergestellt, dass das Teilchen nur mit geringer Wahrscheinlichkeit unbemerkt durch eine Zelle tritt. Auf diese Weise wird das Teilchen verfolgt und für jede betretene Zelle das Gewicht w_i gespeichert, sofern es nicht bereits beim letzten Schritt in dieser Zelle war.

Nach Beendigung müssen die Lebensgeschichten des Primärteilchens, aller Fragmente und aller Sekundärteilchen analysiert werden. Dabei werden die Detektorbeiträge den betretenen Zellen zugeordnet. Im Falle des Impulshöhenschätzers geschieht dies zusammen mit der Berechnung der Energiedepositionen im Rahmen der Dekonvolutionsmethode.

Damit liegen die Summer der Teilchengewichte und die Summer der Beiträge für jede Zelle bereit. Zunächst wird für alle Zellen der Teilchenwert zusammen mit dessen Standardunsicherheit berechnet. Ist die Standardunsicherheit zu groß oder ergibt sich ein Teilchenwert von null, werden die Zellen sukzessive vereinigt. Begonnen wird dabei beim höchsten Energieintervall. Ist die geforderte Standardunsicherheit erreicht, wird der Teilchenwert festgesetzt. Dies wird solange fortgesetzt, bis für jede gegebenenfalls vereinigte Zellen ein Teilchenwert berechnet ist.

Steht nach der Auswertung der Ergebnisse ein Teilchenwert von null für eine Zelle fest, so wird die Signifikanz dieses Werts mit Hilfe der Standardunsicherheit der Gewichte eingeschätzt. Fällt diese unter eine festgelegte Grenze, so handelt es sich um eine Zelle ohne Teilchenwert. In diesem Fall wird für diese Zellen der kleinste Teilchenwert von allen Zellen der Geometrie festgelegt. Dies gilt insbesondere für vereinigte Zellen. Wird diese Unsicherheitsgrenze nicht erreicht, kann keine Aussage getroffen werden. In diesem Fall wird für die entsprechenden Zellen ein benutzerdefiniertes globales Gewichtsfenster eingesetzt.

Alle Teilchenwerte, die eine benutzerdefinierte Standardunsicherheit erreicht haben, werden anschließend in Gewichtsfenstergrenzen umgerechnet. Hierzu wird der Teilchenwert $\zeta_{\max}^*(\Delta V_Q)$ der Zelle, welche die Quelle enthält, verwendet. Falls Quellemissionen in mehreren unterschiedlichen Energieintervallen ΔE_g existieren, wird das Intervall mit dem größten Teilchenwert berücksichtigt. Für alle Zellen $\Delta V_m \times [E_g, E_g + \Delta E_g]$ gilt für das Überlebensgewicht

$$w_S(\Delta V_m, \Delta E_g) = \frac{\zeta_{\max}^*(\Delta V_Q)}{\zeta^*(\Delta V_m, \Delta E_g)}. \quad (23)$$

Von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS wird in [8] empfohlen, dass das Verhältnis zwischen unterer und oberer Grenze in etwa ein Fünftel beträgt. Da ein Computersystem auf dem binären Zahlensystem basiert, können Division und Multiplikation mit 2 besonders effizient durchgeführt werden. Aus diesem Grund gilt in dieser Arbeit zunächst

$$\begin{aligned} w_U(\Delta V_m, \Delta E_g) &= 2 \cdot w_S(\Delta V_m, \Delta E_g), \\ w_L(\Delta V_m, \Delta E_g) &= 0,5 \cdot w_S(\Delta V_m, \Delta E_g) \end{aligned} \quad (24)$$

und das empfohlene Verhältnis wird annähernd erreicht.

Mit den gesetzten Gewichtsfenstern wird anschließend eine problemabhängige benutzerdefinierte Anzahl an weiteren Quellteilchenlebensgeschichten simuliert. Diese liegt typischerweise im Bereich von 100 bis 1000. Erst danach werden die Gewichtsfenster erneut berechnet und gesetzt. Dieses so definierte iterative Verfahren wird solange fortgesetzt, bis die Teilchenwerte aller Zellen mit einer vom Benutzer geforderten Standardabweichung bekannt sind. Diese Grenze unterscheidet sich jedoch von der Standardabweichung, welche für das Setzen der Gewichtsfenster verwendet wird. Vereinigte Zellen werden dabei nicht betrachtet, da deren Wahl nicht vom Anwender beeinflusst werden kann. Demnach müssen die Ergebnisse während der Simulation anwenderseitig regelmäßig kontrolliert werden. Möglicherweise lohnt es sich, vereinigte Zellen bei der eigentlichen Berechnung der Ergebnisse beizubehalten. Um diese Entscheidung zu unterstützen, werden neben den Gewichtsfensterdaten auch die Teilchenwerte aller Zellen mit zugehöriger Standardunsicherheit ausgegeben und gespeichert.

5 Literatur

- [1] W. STOLZ: „Radioaktivität: Grundlagen - Messung - Anwendungen“. Wiesbaden: Teubner, 2005.
- [2] W.A. COLEMAN: „Mathematical Verification of A Certain Monte Carlo Sampling Technique and Applications of Technique To Radiation Transport Problems“, Nucl. Sci. Eng., 32 (1), 76–, 1968.
- [3] T.E. BOOTH, H.G. HUGHES, A. ZUKAITIS, F.B. BROWN, R.D. MOSTELLER, M. BOGGS, J.S. BULL, R.E. PRAEL, R. MARTZ, R.A. FORSTER, A. SOOD, J.T. GOORLEY, J.E. SWEEZY: „MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory“. Los Alamos National Laboratory, 2003.
- [4] H. KRIEGER: „Grundlagen der Strahlungsphysik und des Strahlenschutzes“. Springer Science & Business Media, 2012.
- [5] F.S. GAVALDÀ, J.M.F. VAREA, J.S. ROMA, O. DE C. I D. ECONÒMIC: „PENELOPE 2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport : Workshop Proceedings, Barcelona, Spain 30 June-3 July 2008“. OECD, 2009.
- [6] T.E. BOOTH: „Monte-Carlo Variance Reduction Approaches for Non-Boltzmann Tallies“, Los Alamos Natl. Lab. Rep., (LA-12433), 1992.
- [7] T.E. BOOTH: „Pulse Height Tally Variance Reduction in MCNP“, Los Alamos Natl. Lab. Rep., (LA-13955), 2004.
- [8] T.E. BOOTH, J.S. HENDRICKS: „Importance Estimation In Forward Monte-carlo Calculations“, Nucl. Technol.-Fusion, 5 (1), 90–100, 1984.

Anhang F: Variation der Gewichtsfenstergrenzen

Inhalt

1	Problemstellung	2
2	Berechnung der Gewichtsfenster	3
3	Variation der obere Schranke für die Standardunsicherheit	4
4	Verhältnis zwischen oberer und unter Gewichtsfenstergrenze	9
5	Literatur	12

1 Problemstellung

Zur Berechnung der spektralen Photonenfluenz hinter Bleiabschirmungen verschiedener Tiefen mit Monte Carlo Methoden wird die in Abbildung 1 dargestellte Geometrie verwendet. Die Photonenemission erfolgt aus einer gerichteten ^{137}Cs -Punktquelle. Als Detektor dient ein NaI(Tl)-Szintillator. Die Variation der Absorbiertiefe d erfolgt in Schritten von einer mittleren freien Weglänge $\Lambda_t(E_{\max})$ mit $E_{\max} = 661,7 \text{ keV}$.

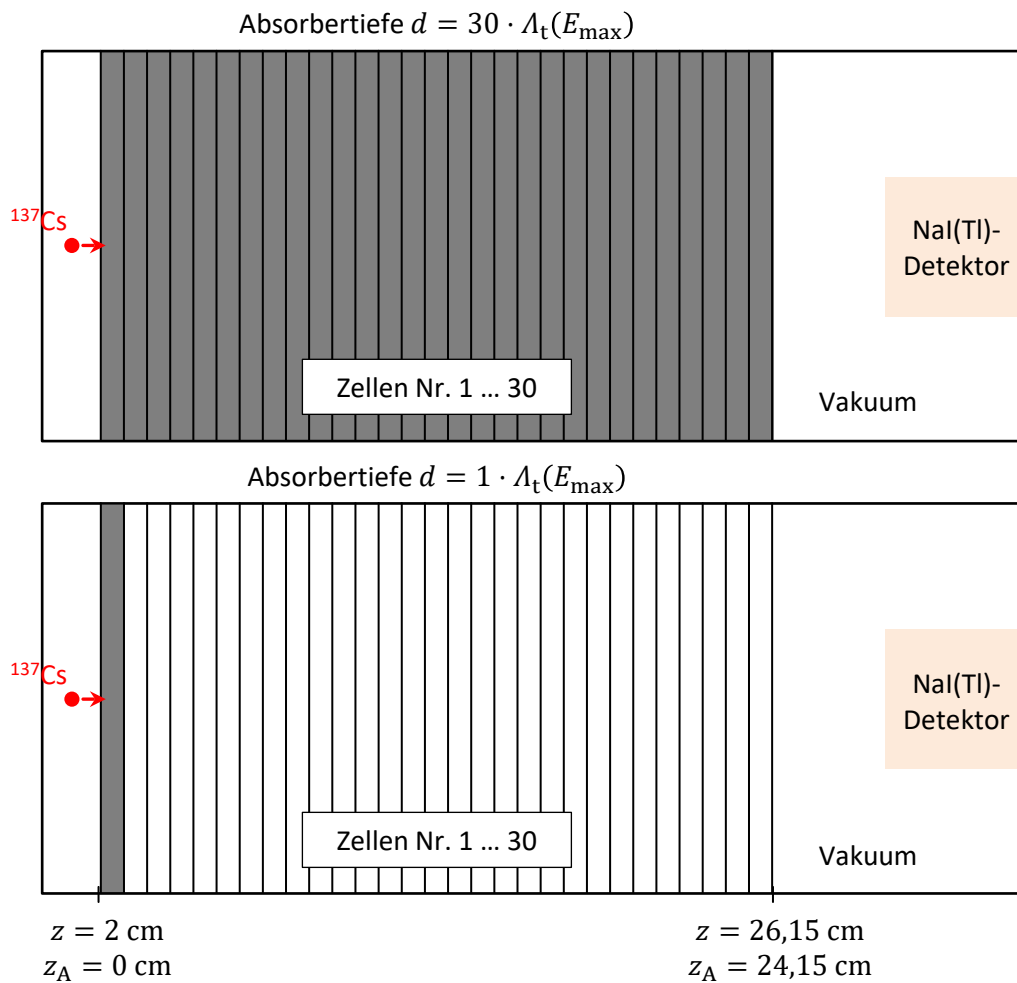


Abbildung 1: Schnitte bei $x = 7,0 \text{ cm}$ durch die Geometrie des Problems der tiefen Durchdringung für Photonenstrahlung des Isotops ^{137}Cs mit einem Bleiabsorber der Tiefe von $30 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ (oben) und von $1 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ (unten)

2 Berechnung der Gewichtsfenster

Alle 30 Absorbierstiefen wird für jede Zelle der jeweiligen Geometrie nach Abbildung 1 der Teilchenwert mit Hilfe des Gewichtsfenstergenerators in AMOS geschätzt wird. Aus den Werten können anschließend die Überlebensgewichte w_S durch Skalierung berechnet werden. Die Skalierung erfolgt mit Hilfe des Teilchenwerts einer kleinen Zelle, welche die punktförmige Quelle umgibt. Dadurch liegt das Quellgewicht immer innerhalb eines Gewichtsfensters. Hierbei werden nur energieunabhängige Fenster.

Für den gesamten Bereich $z > 26,15$ cm werden keine Gewichtsfenster berechnet. Hier gilt nur eine untere Gewichtsgrenze, welche einem Zehntel der kleinsten unteren Grenze w_U^{\min} in der gesamten Geometrie entspricht. Das Überlebensgewicht beträgt hier w_U^{\min} .

Bei analogen Monte Carlo Methoden gelangen ab einer bestimmten Absorbierstiefe praktisch keine Teilchen mehr zum Detektor. Folglich kann mit diesen Verfahren auch kein Teilchenwert berechnet werden. Ein Ausweg bietet jedoch folgendes Vorgehen: Zuerst wird die Teilchenwert in der Geometrie mit $d = 1 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ auf der Grundlage der analogen Monte Carlo Methode geschätzt. Die damit berechneten Gewichtsfenster werden anschließend in der Geometrie mit $d = 2 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ eingesetzt. Hier kann der Teilchenwert jetzt mittels nicht-analoger Monte Carlo Methoden mit Impliziter Absorption und Gewichtsfenstertechnik ermittelt werden. Dies wird anschließend sukzessive für die verbleibenden Absorbierstiefen fortgesetzt.

Auf diese Weise ist es möglich, Detektorergebnisse und Gewichtsfenster für alle Tiefen zu berechnen. Hierbei ist die Gewichtsfensterberechnung erst beendet, wenn eine festgelegte obere Schranke R_{\max} für die Standardunsicherheit des zu ermittelnden Teilchenwerts erreicht ist. Da die Gewichtsfenster durch Skalierung berechnet werden, ergibt sich deren Standardunsicherheit als Summe der einzelnen Standardunsicherheit der beiden Teilchenwerte. Somit beträgt die relative Standardunsicherheit der Fenster höchstens $2 \cdot R_{\max}$.

In Abbildung 2 sind die berechneten Überlebensgewichte w_S für $R_{\max} = 10\%$ für ausgewählte Absorbierstiefen d entlang der z-Achse der Geometrie dargestellt. Für alle Tiefen stimmen die Werte innerhalb des Absorbers im Bereich ihrer Unsicherheit überein. Da der Hauptteil der Detektorbeiträge von Photonen stammt, die ohne Wechselwirkung durch den Absorber gelangen oder nur um kleine Winkel gestreut werden, ist der Teilchenwert der Zellen außerhalb des Absorbers praktisch konstant. Ein Geometrieeffekt auf Grund des sich verkleinernden Abstands zwischen Absorber und Detektor ist nicht zu erkennen. Die Gewichtsfenster ändern sich hier praktisch nicht mehr.

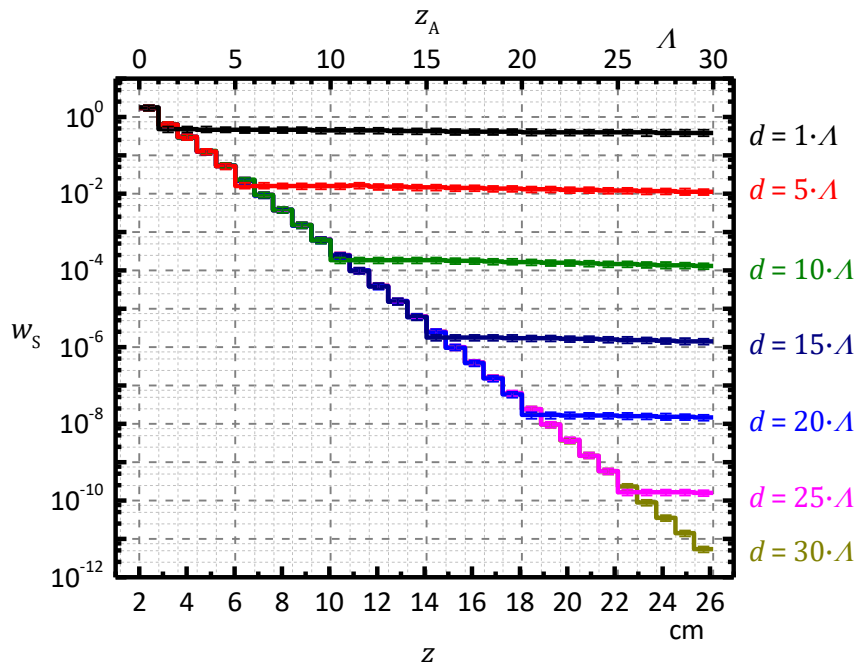


Abbildung 2: Überlebensgewichte w_s entlang der z -Achse (z – innerhalb der Geometrie, z_A – innerhalb des Absorbers in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$, Abbildung 1) für ausgewählte Absorbierertiefen d mit $R_{\max} = 10\%$ (99,73% Vertrauensbereich)

Im Folgenden soll betrachtet werden, wie sich eine Variation der Gewichts Fenster auf die Effizienz der Simulation auswirkt. Das Ergebnis hat Auswirkungen darauf, welche obere Schranke R_{\max} für die Standardunsicherheit des zu ermittelnden Teilchenwerts für spätere Simulationen verwendet werden sollte.

3 Variation der obere Schranke für die Standardunsicherheit

Die obere Schranke R_{\max} für die Standardunsicherheit des zu ermittelnden Teilchenwerts beeinflusst die Effizienz der Gewichts Fensterberechnung. Ist der Wert sehr klein, so werden die Gewichts Fenster zwar genau berechnet, die zugehörige Simulation mit einem kombiniert iterativen Gewichts Fenster-generator kann jedoch eine große Rechenzeit in Anspruch nehmen. Außerdem werden die Grenzen in diesem Fall nicht weiter benötigt, da gleichzeitig auch das gewünschte Simulationsergebnis der Problemstellung ermittelt ist. Wenn R_{\max} hingegen sehr groß ist, werden die Fenster schneller berechnet. Jedoch könnten dann statistische Fluktuationen für eine geringere Effizienzsteigerung oder sogar für eine Rechenzeitvergrößerung sorgen.

In Abbildung 3 sind die berechneten Überlebensgewichte w_S für $R_{\max} = 10\%, 30\%, 50\%$ und 75% für zwei Absorbertiefen d entlang der z -Achse der Geometrie dargestellt. Alle Werte stimmen im Bereich ihrer Unsicherheit überein. Starke statistische Fluktuationen sind nicht erkennbar. Wie aus Abbildung 4 hervorgeht, kann mit einem größeren Wert von R_{\max} Rechenzeit eingespart werden. Für $R_{\max} = 30\%$ sinkt die Zeit T zum Erreichen der oberen Schranke auf etwa ein Zehntel und für $R_{\max} = 75\%$ auf ein Dreißigstel.

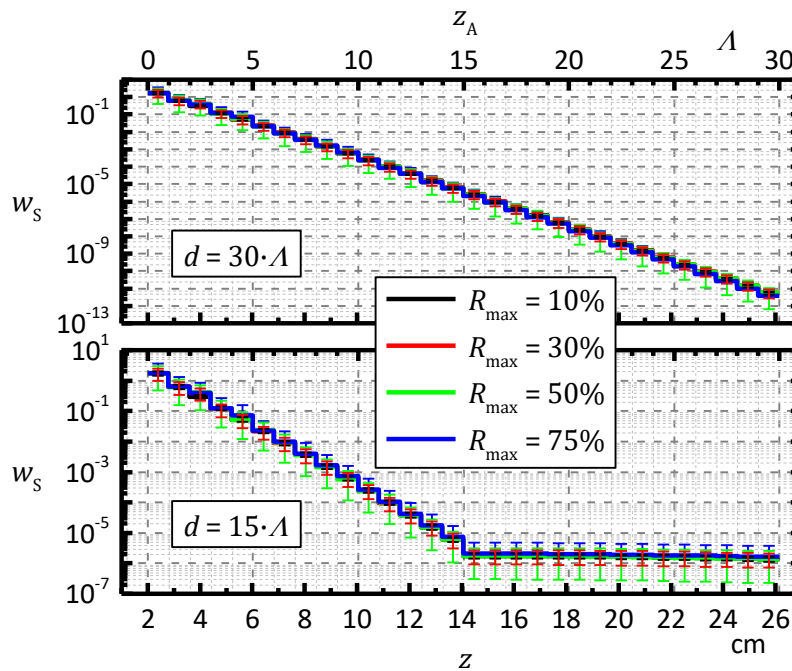


Abbildung 3: Überlebensgewichte w_S entlang der z -Achse (z – innerhalb der Geometrie, z_A – innerhalb des Absorbers in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$, Abbildung 1) für zwei Absorbertiefen d mit $R_{\max} = 10\%, 30\%, 50\%$ und 75% (99,73% Vertrauensbereich)

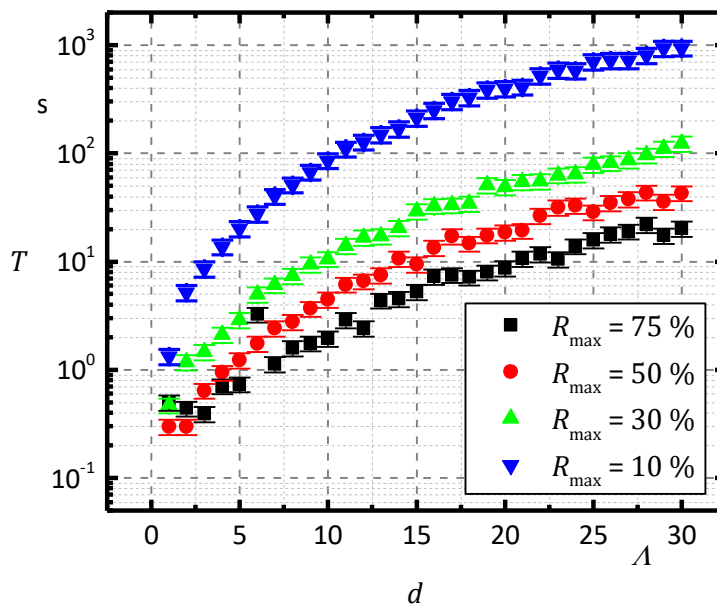


Abbildung 4: Benötigte Rechenzeit T zur Berechnung des Teilchenwerts mit $R_{\max} = 10\%$, 30% , 50% und 75% in Abhängigkeit der Absorbiertiefe d in Einheiten der mittleren freien Weglänge $\Lambda = \Lambda_t(E_{\max})$ (99,73% Vertrauensbereich)

Die Ursache für die Unabhängigkeit der Ergebnisse von R_{\max} ist die geringe Schwankung der Detektorbeiträge in dieser Problemstellung. Photonen, die den Absorber erreichen, unterlagen keiner Wechselwirkung oder wurden nur um kleine Winkel gestreut. Folglich treffen diese mit der Energie $E \approx E_{\max}$ in etwa senkrecht auf die Detektoroberfläche und besitzen auf Grund der mittleren freien Weglänge von 3,55 cm [1] im 5,08 cm tiefen Detektor in etwa die gleiche Spurlänge. Da die Fluenz proportional zur Spurlänge der Photonentrajektorie ist [2], folgt eine geringe statistische Schwankung der Ergebnisse. Demnach wird die Standardunsicherheit der Ergebnisse hauptsächlich durch die $1/\sqrt{N}$ -Abhängigkeit von der Anzahl an Quellteilchen N bestimmt. Verstärkt wird dies durch die Varianzreduktion der Gewichtsverteilung auf Grund der Gewichtsfenstertechnik.

Im Allgemeinen kann jedoch nicht von so einer geringen Schwankung der Beiträge in allen Problemstellungen ausgegangen werden. Aus diesem Grund wird im Folgenden die Auswirkung der Variation der Gewichtsfenster auf die Effizienz der Simulation durch Skalierung der Überlebensgewichte analysiert. In Abbildung 5 ist dargestellt, wie die Überlebensgewichte verändert werden.

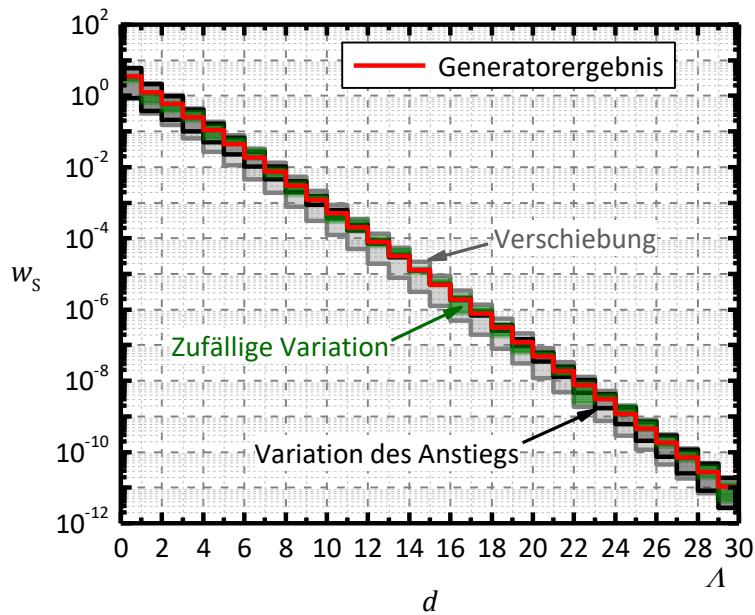


Abbildung 5: Variation der vom Generator berechneten Überlebensgewichte w_s innerhalb des Absorbers mit einer Tiefe von $30 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$

Zum einen erfolgt eine gleichmäßige Verschiebung (Multiplikation mit einem Faktor) aller Fenster um bis zu 75 %. Dies entspricht einer zufälligen gleichgerichteten Schwankung des mittleren Beitrags aller Zellen und kann auftreten, wenn zum Detektorergebnis beitragende Lebensgeschichten alle Zellen betreten und dadurch der Beitrag für jede Zelle identisch verändert wird.

Weiterhin wird der Verlauf so verändert, dass die Grenzen am Anfang und am Ende des Absorbers um bis zu ± 75 % verändert sind. Dies resultiert in eine Veränderung des Anstiegs und repräsentiert den Fall, dass zufällig eine große Anzahl an Photonen am Anfang des Absorbers absorbiert wird oder zufällig durch den Absorber gelangt. Schließlich wird eine zufällige Variation der Daten um bis zu 75 % vorgenommen, um eine zufällige statistische Schwankung nachzustellen.

Die Ergebnisse dieser Variationen sind in Abbildung 6 dargestellt. Der Parameter δ gibt die Stärke der Variation an. $\delta = 1$ entspricht dem Generatorergebnis. Bei der Variation des Anstiegs beziehungsweise bei Verschiebung steht beispielsweise $\delta = 1,75$ für eine Vergrößerung des Anstiegs um 75 % beziehungsweise für eine Verschiebung um +75 % und $\delta = 0,25$ für eine Verkleinerung um 75 % beziehungsweise für eine Verschiebung um -75 %. Bei der zufälligen Variation hingegen wird durch $\delta = 1,75$ eine Schwankung um ± 75 % repräsentiert.

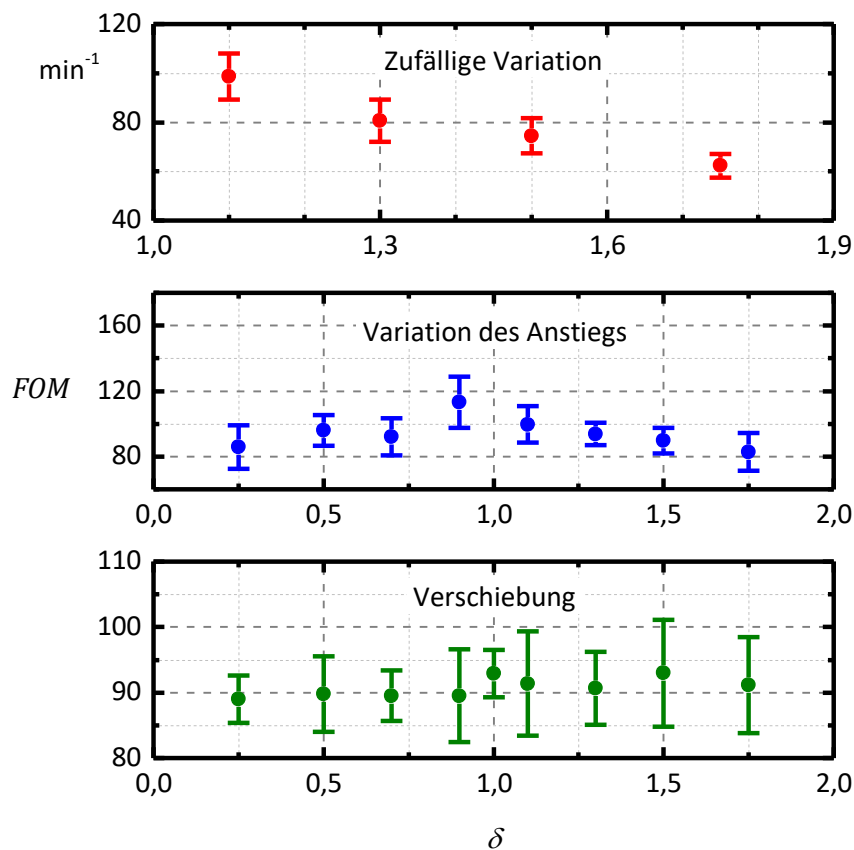


Abbildung 6: Mittlere FOM aus zehn Simulation mit jeweils $N_Q = 10^5$ Quellteilchen in Abhängigkeit vom Parameter δ (99,73% Vertrauensbereich)

Durch die Variation des Anstiegs (mittleres Diagramm) und der Verschiebung (unteres Diagramm) ist keine signifikante Veränderung der Effizienz gemessen durch die FOM feststellbar. Zufällige Variation (oberes Diagramm) hingegen resultiert in eine Verkleinerung der FOM auf die Hälfte bei $\delta = 1,75$. Für eine Schwankung um 30 % liegen die Werte noch innerhalb ihrer Abweichungen. Folglich wird ein Wert von 30 % als obere Schranke R_{\max} für die empirische Standardabweichung des zu ermittelnden Teilchenwerts festgelegt.

Eine Skalierung der Überlebensgewichte w_S (Verschiebung des Verlaufs) führt zu keiner signifikanten Veränderung der Effizienz, da w_S indirekt proportional zum Teilchenwert ist. Der Proportionalitätsfaktor ist hierbei jedoch frei wählbar. Das Startgewicht $w_0 = 1$ eines Teilchens wird durch Russisch Roulette oder Teilchensplitting bei Eintritt in den Absorber an das skalierte Überlebensgewicht angepasst. Die dafür benötigte zusätzliche Rechenzeit ist bei den hier betrachteten Veränderungen vernachlässigbar klein. Durch eine Variation des Anstiegs und durch zufällige Variation sind die Überlebensgewichte nicht mehr indirekt proportional zum Teilchenwert. Folglich muss sich die FOM verkleinern, was im Fall der Anstiegsveränderung zwar nicht signifikant, jedoch erkennbar ist.

4 Verhältnis zwischen oberer und unter Gewichtsfenstergrenze

Aus dem vom Generator berechneten Überlebensgewicht w_S werden die obere w_U und die untere Gewichtsfenstergrenze w_L gesetzt. Von T.E. BOOTH und J.S. HENDRICKS wird in [2] ein Faktor von etwa fünf als Unterschied empfohlen, $w_U/w_L \approx 5$. Dies soll im Folgenden überprüft werden. Dazu wird die Geometrie mit einem Absorber der Tiefe $d = 30 \cdot \lambda_t(E_{\max})$ verwendet. Unter Variation der Gewichtsfenstergrenzen werden jeweils $N = 5 \cdot 10^5$ Quellteilchen zehn Mal simuliert. Da nicht bekannt ist, wie die obere und die untere Grenze aus dem Überlebensgewicht zu berechnen sind, gilt zum einen $w_U = w_S$ (asymmetrisch) und zum anderen $w_U/w_S = w_S/w_L$ (symmetrisch). Die Ergebnisse sind in Abbildung 7 in Abhängigkeit vom Verhältnis w_U/w_L der Grenzen zueinander dargestellt. Dabei wird der Unterschied der mittleren FOM zum Wert des symmetrischen Ansatzes für $w_U/w_L = 5$ betrachtet. Es gilt

$$G = G(w_U/w_L) = \frac{FOM(w_U/w_L)}{FOM(5)} \quad (1)$$

für die in Abbildung 7 dargestellte Variable.

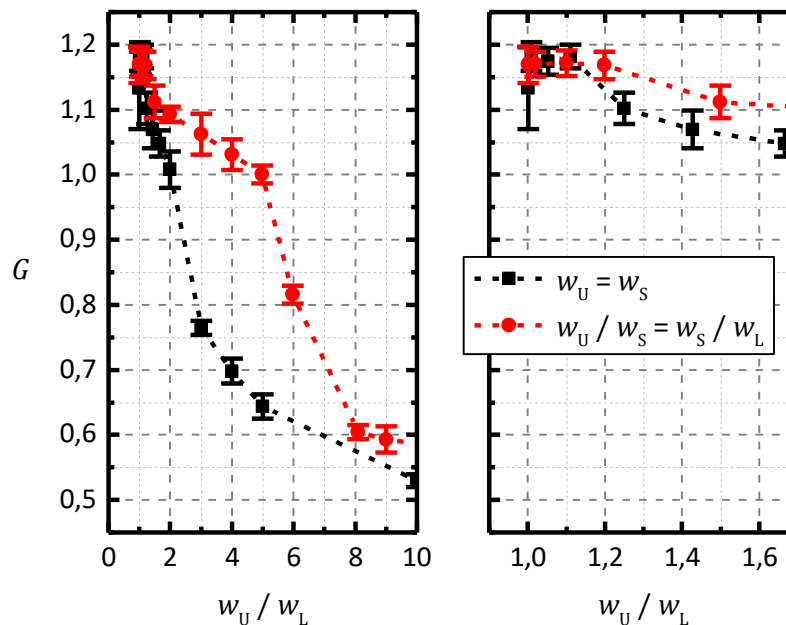


Abbildung 7: Veränderung der mittlere FOM aus zehn Simulation mit jeweils $5 \cdot N_Q = 10^5$ Quellteilchen beschrieben durch G nach Gleichung (1) in Abhängigkeit vom Verhältnis der Gewichtsfenstergrenzen (99,73% Vertrauensbereich)

Die Ergebnisse zeigen, dass für $w_U/w_L \gtrsim 1,2$ eine symmetrische Anordnung der Gewichtsfenstergrenzen einer asymmetrischen zu bevorzugen ist. Die Ursache ist die Zunahme an Splitting-Prozessen durch eine Verkleinerung der oberen Grenze. Dadurch entstehen mehr Fragmente und folglich müssen mehr Lebensgeschichten simuliert werden. Für $w_U/w_L \approx 1$ verschwindet dieser Mehraufwand.

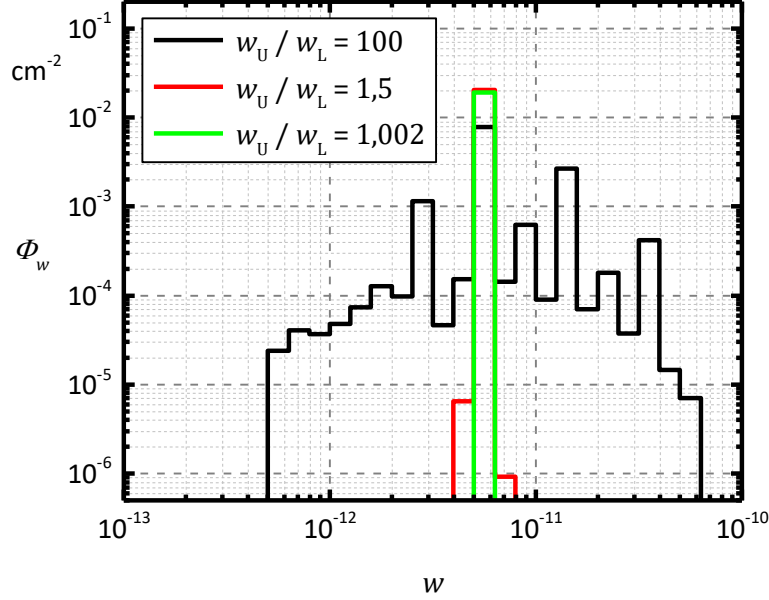


Abbildung 8: Gewichtsbezogene Fluenz Φ_w der auf den Detektor treffenden Photonen für eine symmetrische Anordnung der Gewichtsfenstergrenzen

Für beide Anordnungen vergrößert sich die Effizienz bei Verkleinerung des Verhältnisses w_U/w_L . Erst im Bereich $w_U/w_L \approx 1$ gibt es keine Steigerung mehr. Eine Erklärung dieses Verhaltens ist in Abbildung 8 dargestellt. Die Gewichtsbezogene Fluenz

$$\Phi_w = \frac{d\Phi}{dw} = \int_0^{E_{\max}} \Phi_{Ew}(\vec{r}, E, w) dE \quad (2)$$

gibt dabei die Verteilung der zur Fluenz beitragenden Teilchengewichte w wieder.

Für sehr große Fenster, $w_U/w_L = 100$, ergibt sich eine Breite Verteilung über mehrere Größenordnung mit ausgeprägten Maxima. Diese werden größtenteils durch Photonen im Bereich der Maximalenergie bestimmt, welche als Fragmente aus mehreren Splitting-Prozessen und dazu nur um kleine Winkel gestreut den Detektor erreichen. Erfolgt dabei keine Streuung innerhalb der letzten drei Schichten im Absorber, so entsprechen die Gewichte im Detektor den dazugehörigen Überlebensgewichten w_S von $5,20 \cdot 10^{-12}$, $1,35 \cdot 10^{-11}$ und $3,44 \cdot 10^{-11}$. Diese werden durch das Gewichtsfenster der letzten Schicht mit $w_U = 5,20 \cdot 10^{-11}$ und $w_L = 5,20 \cdot 10^{-13}$ nicht weiter beeinflusst.

Wenn hingegen eine Wechselwirkung innerhalb der letzten drei Schichten erfolgt, so wird das Gewicht entsprechend der Photoeffektwahrscheinlichkeit von 39,4% [1] reduziert. Bei Erreichen des Detektors führt dies zur Ausbildung von Peaks bei $w = 3,15 \cdot 10^{-12}$, $w = 8,18 \cdot 10^{-12}$ und $w = 2,08 \cdot 10^{-11}$. Der Untergrund zwischen den Maxima der Gewichtsverteilung wird durch im Absorber gestreute Photonen geringerer Energie gebildet.

Werden die Gewichtsfenster verkleinert, so wird die Verteilung in Richtung des Überlebensgewichts der letzten Absorberschicht zusammen geschoben. Dadurch wird die Varianz der Verteilung verkleinert. Während diese bei $w_U/w_L = 1,5$ noch schmal und gaußförmig ist, zeigt sich für $w_U/w_L = 1,002$ bei der gewählten Auflösung in Abbildung 8 nur noch ein deltaförmiger Peak. Der Unterschied zwischen den letzten beiden Verteilung ist gering. Folglich ist nur eine kleine Verbesserung der Effizienz zu erwarten, was in Abbildung 7 bestätigt wird.

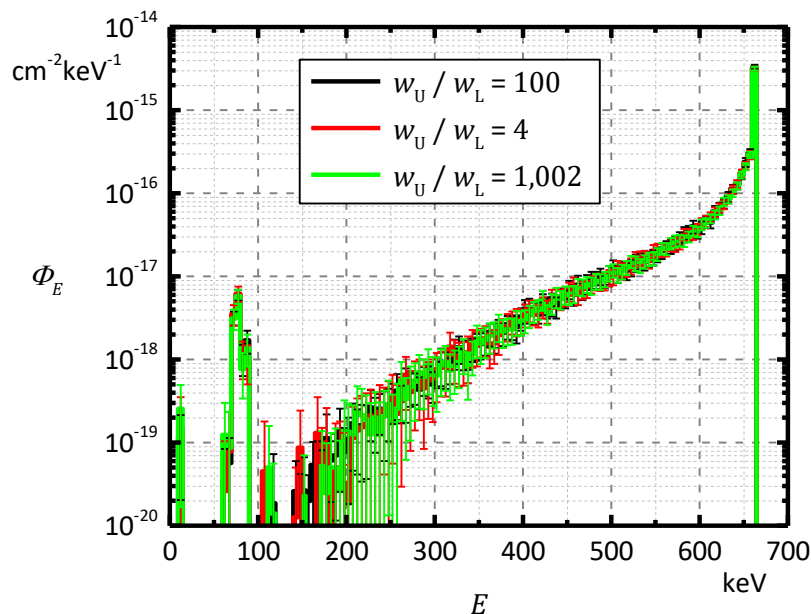


Abbildung 9: Spektrale Fluenz Φ_E der auf den Detektor treffenden Photonen in Abhängigkeit der Energie E für eine Absorbertiefe von $30 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$ für eine symmetrische Anordnung der Gewichtsfenstergrenzen (99,73% Vertrauensbereich der empirischen Standardabweichung)

Der aus immer kleiner werdenden Gewichtsfenstern resultierende Effekt für die zu berechnende spektrale Fluenz wird in Abbildung 9 deutlich. Dargestellt sind die spektralen Fluenzen der auf den Detektor treffenden Photonen für eine Absorbertiefe von $30 \cdot \Lambda_t(E_{\max})$, berechnet mit unterschiedlichen Werten für w_U/w_L unter Verwendung einer symmetrischen Anordnung Fenstergrenzen.

Das Abbruchkriterium der Simulation ist das Erreichen einer von AMOS berechneten Standardunsicherheit von 10 % (99,73% Vertrauensbereich) für die spektrale Fluenz, wie es in der Anwendung üblich ist. Dazu werden in AMOS die Standardunsicherheiten aller Energien zunächst nach der Größe beginnend bei der kleinsten sortiert. Anschließend wird der Mittelwert von den ersten 75 % dieser Werteliste berechnet. Das Ergebnis gilt als Maß für Standardunsicherheit des Spektrums.

Für den Energiebereich $E = 400$ keV ist die Standardunsicherheit der spektralen Fluenz in allen drei Fällen etwa gleich groß. Die ändert sich insbesondere im niederenergetischen Bereich $150 \text{ keV} \leq E \leq 300 \text{ keV}$. Hier ist die Unsicherheit umso größer, je kleiner die Gewichtsfenster sind. Folglich sorgen kleinere Fenster für eine stärkere Unterdrückung von aus Sicht der Gewichtsfenstertechnik wenig signifikanten Beiträgen durch Russisch Roulette. In diesem Simulationsbeispiel steht die Berechnung der Fluenz im Vordergrund. Daher sind diese Beiträge auch in Bezug auf das gewünschte Ergebnis nicht signifikant.

Im Allgemeinen ist jedoch zu beachten, dass durch den Einsatz der Gewichtsfenstertechnik Beiträge unterdrückt werden, welche in einer speziellen Aufgabenstellung in Hinblick auf das gewünschte Ergebnis signifikant sein können. Dies ist abhängig von der Wahl der Fenstergröße. Für das hier betrachtete Beispiel sind optimale Gewichtsfenster symmetrisch mit $w_U/w_L = 1,2$ verwendet. Kleinere Verhältnisse führen zu keiner signifikanten Verbesserung der Effizienz.

5 Literatur

- [1] D.E. CULLEN, J.H. HUBBELL, L. KISSEL: „EPDL97: the evaluated photon data library,'97 version“, UCRL-50400, 6 (5), 1–28, 1997.
- [2] D.J. THOMAS: „ICRU report 85: fundamental quantities and units for ionizing radiation“. Oxford University Press, 2012.

Anhang G: Hypothetisches Streuexperiment

Inhalt

1	Problemstellung	2
2	Ergebnisse	3

1 Problemstellung

Analoge Monte Carlo Methoden scheitern an der Berechnung der tiefen Durchdringung, da praktisch alle Photonen vor Erreichen des Detektors absorbiert werden. Erst die Implizite Absorption zusammen mit der Gewichtsfensterfentertechnik erzielt ein Ergebnis. Dabei werden solche Teilchen bevorzugt, die tief in den Absorber eindringen. Die Simulation rückgestreute Photonen wird hingegen frühzeitig beendet.

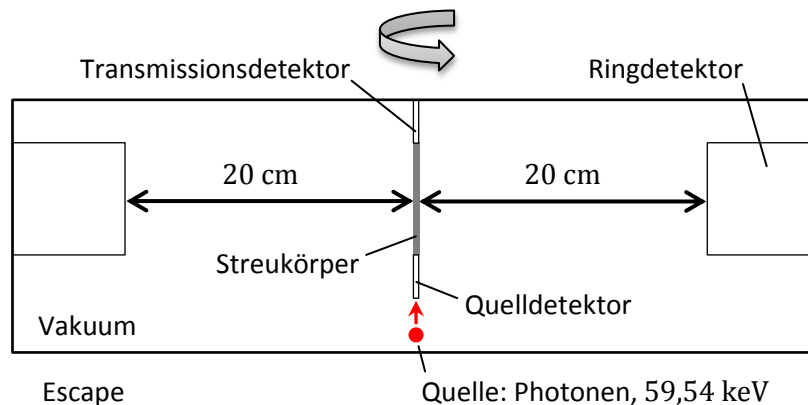


Abbildung 1: Schnitt durch die rotationssymmetrische Geometrie des hypothetischen Streuexperiments

In vielen Problemstellungen gibt es jedoch auch signifikante Beiträge von gestreuten Teilchen. Diese unterscheiden sich anhand ihrer Energie von den Primärteilchen. Folglich besteht prinzipiell die Möglichkeit, um den richtigen Winkel gestreute Teilchen mittels energieabhängiger Gewichtsfensterfentertechnik zu bevorzugen. Um dies zu validieren, wird ein hypothetisches Streuexperiment simuliert. Deswegen Geometrie ist in Abbildung 1 dargestellt.

Ein nur 1 μm dicker und 0,91 cm langer, zylinderförmiger Aluminiumstab wird mit einem monoenergetischen Nadelstrahl an Photonen bestrahlt. Die Photonenenergie entspricht der wahrscheinlichsten Emission von Americium-241 und beträgt 59,54 keV. Die Länge ist so gewählt, dass die Intensität des Strahls hinter dem Streukörper um 50% reduziert wird.

Um den Aluminiumstab wird in einem großen Abstand (beispielhaft 20 cm) ein Ringdetektor platziert. Hier werden alle gestreuten Photonen mit einem Streuwinkel im Bereich von $87,4^\circ$ bis $92,6^\circ$ gezählt. Die dazugehörigen Energien inkohärent gestreuter Photonen betragen 53,0 keV bis 53,6 keV. Zusätzlich werden alle Photonen im Transmissionsdetektor saldiert, welche ohne Wechselwirkung durch den Stab gelangen. Zum Vergleich wird ein Quelldetektor direkt vor dem Stab platziert. Alle Detektoren schätzen die Fluenz. Der Durchmesser von 1 μm soll die Wahrscheinlichkeit für Mehrfachwechselwirkungen im Stab minimieren.

2 Ergebnisse

Dieses Streuexperiment wird sowohl analog als auch mit Impliziter Absorption und energieabhängiger Gewichtsfenstertechnik simuliert. Die Ergebnisse sind in Tabelle 1 aufgelistet. Das angegebene Überlebensgewicht w_S der Gewichtsfenster gilt hierbei für die Quelle und für den Streustab bezüglich des Energiebereichs 53,0 keV bis 53,6 keV und bezüglich der Quellenergie 59,54 keV. Alle anderen Energiebereiche besitzen ein Fenster mit $w_S = 10,0$. Weiterhin bezieht sich die Effizienz gemessen durch die FOM auf die Messabweichung des Ringdetektors. Alle Werte ergeben sich aus Mittelung über zehn Simulationen mit jeweils 10^5 Quellteilchen.

Tabelle 1: Fluenzen im Ringdetektor Φ_R und im Transmissionsdetektor Φ_T bezogen auf die Fluenz des Quelldetektors Φ_0 mit der jeweiligen Anzahl N an beitragenden Lebensgeschichten und der Effizienz FOM der Simulation (Mittelwerte aus zehn Simulationen mit 99,73% Vertrauensbereich)

	$\frac{\Phi_T}{\Phi_0}$	$\frac{N_T}{N_0}$ in%	$\frac{\Phi_R}{\Phi_0}$ in 10^{-3}	$\frac{N_R}{N_0}$ in%	FOM in s^{-1}
Analog	$0,5 \pm 0,3\%$	$50,17 \pm 0,15$	$4,75 \pm 4,5\%$	$0,48 \pm 0,02$	674 ± 29
$w_S = 0,1$	$0,5 \pm 0,1\%$	$99,91 \pm 0,01$	$4,73 \pm 1,2\%$	$7,13 \pm 0,09$	1968 ± 26
$w_S = 0,01$	$0,5 \pm 0,03\%$	$100,0 \pm 0,0$	$4,74 \pm 0,4\%$	$52,4 \pm 0,2$	2208 ± 14
$w_S = 0,001$	$0,5 \pm 0,01\%$	$100,0 \pm 0,0$	$4,74 \pm 0,1\%$	$99,94 \pm 0,01$	2235 ± 7

Die berechneten Werte für die Fluenz stimmen bei allen Simulationen innerhalb ihrer Messabweichungen überein. Für den Transmissionsdetektor fällt die Fluenz wie erwartet auf die Hälfte ab, während den Ringdetektor nur etwa fünf Promille der Quellteilchen erreichen.

Der entscheidende Unterschied liegt jedoch im Anteil der Lebensgeschichten, welche einen Beitrag zum jeweiligen Detektor liefern. Bei analoger Simulation sind dies die Hälfte für den Transmissionsdetektor und fünf Promille für den Ringdetektor. Diese Anteile können mit Hilfe energieabhängiger Gewichtsfenster verändert werden. Durch $w_S < 1$ erfolgt je nach Simulation Teilchensplitting im Verhältnis 1: 10, 1: 100 bzw. 1: 1000 direkt nach der Quellemission. Dadurch vergrößert sich die Anzahl an Teilchen, welche pro Lebensgeschichte in den Streukörper eindringen und einen Beitrag in einem der Detektoren liefern können.

Mittels energieabhängigem Russisch Roulette werden diejenigen Teilchen aussortiert, die nicht in Richtung des Ringdetektors inkohärent gestreut werden. Die Wahrscheinlichkeit zur Beendigung der Lebensgeschichte liegt bei 90%, 99% bzw. 99,9%. Kohärente gestreute Photonen können hingegen nicht selektiert werden.

Energieabhängiges Teilchensplitting und Russisch Roulette sorgen in diesem Beispiel für eine Effizienzsteigerung um etwa 230% für $w_S = 0,001$. Ein etwas geringerer Wert ergibt sich für $w_S = 0,01$, sodass eine weitere Verkleinerung des Überlebensgewichts zu keiner signifikanten Verbesserung mehr führen würde. Die Rechenzeitverkürzung wird hauptsächlich durch Teilchensplitting verursacht. Ohne Russisch Roulette im Streukörper würde die Effizienz nur um 10% sinken.

Anhang H: Ergebnisse zur Bestrahlung eines Personendosimeters

Inhalt

1	Bestrahlung mit ^{137}Cs und ^{60}Co	2
2	Bestrahlung mit N100 und N60	5
3	Bestrahlung mit N15	7
3.1	Aufteilung in zwei Simulationen	7
3.2	Verkleinerte Quelle	8
3.3	Verkleinerte Quelle und kleines Phantom	9
3.4	Vernachlässigung des dritten Elements mit Bleifilter	9
4	Literatur	10

1 Bestrahlung mit ^{137}Cs und ^{60}Co

Aufgrund der großen Simulationszeiten wird jede Simulation mit der jeweiligen effizienzsteigernden Methode nur ein Mal durchgeführt. Anschließend wird auch hier mit Hilfe der $1/\sqrt{N}$ -Abhängigkeit der Standardunsicherheit von der Quellteilchenzahl N berechnet, wie groß die optimale Anzahl für eine Messabweichung von $R = 3\%$ sein müsste. Daraus ergeben sich dann die Simulationszeit und die Effizienz, gemessen durch die FOM. Die Standardunsicherheit der Rechenzeit beträgt 5% (99,73% Vertrauensbereich). Dieser Wert folgt aus der großen Anzahl an Simulationen für die tiefe Durchdringung, wobei sich eine mittlere Standardunsicherheit der Rechenzeit von $(4,3 \pm 0,7)\%$ für Einzelmessungen ergibt. Die Effizienz bezieht sich auf die gesamte Rechenzeit. Die Ergebnisse aus der analogen Monte Carlo Methode ohne Veränderung der Geometrie sind zum Vergleich mit aufgeführt.

Tabelle 1: Optimale Aufteilung der analogen Simulationen 1 und 2 im Vergleich zur analogen Simulation ohne Aufteilung (N – optimale Quellteilchenanzahl, D^i/Φ – Dosis bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ , t – Simulationszeit, FOM – Effizienz, 99,73% Vertrauensbereich)

Simulation	N	D^1/Φ in pGy/cm ⁻²	D^2/Φ in pGy/cm ⁻²	D^3/Φ in pGy/cm ⁻²	t in min	FOM in min ⁻¹
^{137}Cs , ohne	$4,0 \cdot 10^8$	$2,49 \pm 0,07$	$2,60 \pm 0,08$	$3,88 \pm 0,10$	119 ± 6	$9,4 \pm 0,5$
1, ^{137}Cs	$5,0 \cdot 10^7$	$0,22 \pm 0,03$	$0,20 \pm 0,03$	$0,17 \pm 0,03$	$18,0 \pm 0,9$	$12,7 \pm 0,6$
2, ^{137}Cs	$6,3 \cdot 10^6$	$2,27 \pm 0,07$	$2,39 \pm 0,07$	$3,75 \pm 0,09$	$77,5 \pm 3,9$	
^{60}Co , ohne	$5,0 \cdot 10^8$	$6,13 \pm 0,18$	$9,36 \pm 0,24$	$12,7 \pm 0,3$	128 ± 6	$8,7 \pm 0,4$
1, ^{60}Co	$7,9 \cdot 10^7$	$0,43 \pm 0,06$	$0,42 \pm 0,06$	$0,42 \pm 0,07$	$17,2 \pm 0,9$	$10,4 \pm 0,5$
2, ^{60}Co	$7,9 \cdot 10^6$	$5,7 \pm 0,2$	$9,1 \pm 0,2$	$12,4 \pm 0,3$	102 ± 5	

Die Aufteilung von einer in zwei analoge Simulation erzielt einen Effizienzgewinn von etwa 30% bei ^{137}Cs und von 20% bei ^{60}Co . Dadurch reduziert sich die Rechenzeit um 20 min bzw. 10 min. Unter Berücksichtigung der Messunsicherheiten der FOM von 10% sind diese Gewinne jedoch nicht von praktischer Bedeutung. Für beide Bestrahlungsarten benötigen beide Monte Carlo Methoden etwa die gleiche Rechenzeit von zwei Stunden.

In den Tabellen 2 und 3 sind die Ergebnisse der Simulationen unter Einsatz der Gewichtsfenstertechnik zusammengefasst. Die Simulation 1 umfasst die Berechnung der Beiträge aus dem Wasserphantom. Diese werden mit energieabhängigen und -unabhängigen Fenstern durchgeführt. Simulation 2 betrifft nur die direkte Bestrahlung des Dosimeters und wird ohne Gewichtsfenstertechnik durchge-

führt. Auch hier wird die optimale Aufteilung beider Simulationen bezüglich der Quellteilchenzahl N mit Hilfe der $1/\sqrt{N}$ -Abhängigkeit der Standardunsicherheit des Ergebnisses berechnet. Die Messabweichung und die Simulationszeit werden entsprechend skaliert. Die Ergebnisse aus der analogen Monte Carlo Methode mit optimaler Aufteilung aus Tabelle 1 bzw. ohne Veränderung der Geometrie sind zum Vergleich mit aufgeführt.

Tabelle 2: Optimale Aufteilung der Simulationen 1 und 2 für ^{137}Cs -Bestrahlung im Vergleich zur analogen Simulation ohne Aufteilung (o – analog, u – energieunabhängige Fenster, a – energieabhängige Fenster, N – optimale Quellteilchenanzahl, D^i/Φ – Dosis bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ , t – Simulationszeit, FOM – Effizienz, 99,73% Vertrauensbereich)

Simulation	N	D^1/Φ in pGy/cm $^{-2}$	D^2/Φ in pGy/cm $^{-2}$	D^3/Φ in pGy/cm $^{-2}$	t in min	FOM in min $^{-1}$
ohne	$4,0 \cdot 10^8$	$2,49 \pm 0,07$	$2,60 \pm 0,08$	$3,88 \pm 0,10$	119 ± 6	$9,4 \pm 0,5$
1, o	$5,0 \cdot 10^7$	$0,22 \pm 0,03$	$0,20 \pm 0,03$	$0,17 \pm 0,03$	$18,0 \pm 0,9$	$12,7 \pm 0,6$
2, o	$6,3 \cdot 10^6$	$2,27 \pm 0,07$	$2,39 \pm 0,07$	$3,75 \pm 0,09$	$77,5 \pm 3,9$	
1, u	$6,3 \cdot 10^7$	$0,21 \pm 0,04$	$0,21 \pm 0,04$	$0,18 \pm 0,02$	$34,1 \pm 1,7$	$9,6 \pm 0,5$
2, o	$7,1 \cdot 10^6$	$2,27 \pm 0,06$	$2,39 \pm 0,06$	$3,75 \pm 0,09$	$86,9 \pm 4,3$	
1, a	$3,2 \cdot 10^8$	$0,20 \pm 0,04$	$0,20 \pm 0,04$	$0,18 \pm 0,02$	$48,1 \pm 2,4$	$8,3 \pm 0,4$
2, o	$7,9 \cdot 10^6$	$2,27 \pm 0,06$	$2,39 \pm 0,06$	$3,75 \pm 0,08$	$97,5 \pm 4,9$	

Tabelle 3: Optimale Aufteilung der Simulationen 1 und 2 für ^{60}Co -Bestrahlung im Vergleich zur analogen Simulation ohne Aufteilung (o – analog, u – energieunabhängige Fenster, a – energieabhängige Fenster, N – optimale Quellteilchenanzahl, D^i/Φ – Dosis bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ , t – Simulationszeit, FOM – Effizienz, 99,73% Vertrauensbereich)

Simulation	N	D^1/Φ in pGy/cm $^{-2}$	D^2/Φ in pGy/cm $^{-2}$	D^3/Φ in pGy/cm $^{-2}$	t in min	FOM in min $^{-1}$
ohne	$5,0 \cdot 10^8$	$6,13 \pm 0,18$	$9,36 \pm 0,24$	$12,7 \pm 0,3$	128 ± 6	$8,7 \pm 0,4$
1, o	$7,9 \cdot 10^7$	$0,43 \pm 0,06$	$0,42 \pm 0,06$	$0,42 \pm 0,07$	$17,2 \pm 0,9$	$10,4 \pm 0,5$
2, o	$7,9 \cdot 10^6$	$5,7 \pm 0,2$	$9,1 \pm 0,2$	$12,4 \pm 0,3$	102 ± 5	
1, u	$7,1 \cdot 10^7$	$0,45 \pm 0,07$	$0,41 \pm 0,06$	$0,43 \pm 0,08$	$19,1 \pm 1,0$	$10,1 \pm 0,5$
2, o	$7,9 \cdot 10^6$	$5,7 \pm 0,2$	$9,1 \pm 0,2$	$12,4 \pm 0,3$	102 ± 5	
1, a	$3,2 \cdot 10^7$	$0,44 \pm 0,09$	$0,41 \pm 0,08$	$0,44 \pm 0,04$	$43,0 \pm 2,2$	$7,5 \pm 0,4$
2, o	$8,9 \cdot 10^6$	$5,7 \pm 0,2$	$9,1 \pm 0,2$	$12,4 \pm 0,3$	114 ± 6	

Im Vergleich zu den analogen Simulationen stimmen alle Ergebnisse im Rahmen ihrer Messabweichung überein. Eine Verbesserung der Effizienz kann jedoch nicht erzielt werden. Während energieunabhängige Gewichts Fenster die gleiche Rechenzeit wie analoge Methoden erzielen, verringert sich die Effizienz der Simulation mit energieabhängigen Fenstern um etwa 10%.

Der Einsatz energieunabhängiger Fenster sorgt ebenfalls nicht für eine Vergrößerung der Effizienz. Die Vergrößerung der Population mittels Teilchensplitting im Bereich des Dosimeters bei gleichzeitiger Verkleinerung in den Randbereichen führt zu keiner schnelleren Berechnung der Dosiswerte. Da die mittlere Anzahl an Wechselwirkungen im Phantom bei etwa eins liegt [1], ist die Rechenzeit pro Lebensgeschichte von analogen Monte Carlo Methoden schon vergleichsweise gering. Allein mit impliziter Absorption würde die Effizienz jedoch auf etwa ein Drittel sinken.

Neben den hier im Detail aufgeführten, effizienzsteigernden Methoden wird die Gewichts Fenster-technik auch auf die Simulation der vollständigen Geometrie angewendet. Dies führt jedoch zu keiner Verbesserung. Die Effizienz verringert sich bestenfalls auf etwa 16% im Vergleich zur analogen Methode. Die Fenster-technik sorgt hier für eine detaillierte Berechnung der für das Gesamtergebnis weniger signifikanten Streuprozesse im Phantom, was mehr Rechenzeit benötigt.

2 Bestrahlung mit N100 und N60

In den Tabellen 4 und 5 sind die Ergebnisse für N100- und N60-Bestrahlung aufgelistet. Die optimale Aufteilung erfolgt in Simulation 1 und 2, mit und ohne Phantom. Die dafür notwendige Quellteilchenzahl wird auch hier mit Hilfe der $1/\sqrt{N}$ -Abhängigkeit der Standardunsicherheit vom Ergebnis berechnet. Die Messabweichung und die Simulationszeit werden entsprechend skaliert. Dies gilt auch für alle folgenden Ergebnisse in diesem Kapitel. Zum Vergleich sind auch die Ergebnisse der analogen Monte Carlo Methode ohne Veränderung der Geometrie aufgeführt.

Tabelle 4: Optimale Aufteilung der Simulationen 1 und 2 für N100-Bestrahlung im Vergleich zur Simulation ohne Aufteilung (o – analog, u – energieunabhängige Fenster, a – energieabhängige Fenster, N – optimale Quellteilchenanzahl, D^i/Φ – Dosis bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ , t – Simulationszeit, FOM – Effizienz, 99,73% Vertrauensbereich)

Simulation	N	D^1/Φ in fGy/cm ⁻²	D^2/Φ in fGy/cm ⁻²	D^3/Φ in fGy/cm ⁻²	t in h	FOM in h ⁻¹
ohne, o	$1,5 \cdot 10^9$	443 ± 6	437 ± 6	125 ± 4	$25,9 \pm 1,3$	$42,9 \pm 2,1$
ohne, u	$7,6 \cdot 10^8$	441 ± 7	439 ± 8	128 ± 4	$18,0 \pm 0,9$	$61,6 \pm 3,1$
ohne, a	$7,6 \cdot 10^8$	441 ± 7	439 ± 7	126 ± 4	$20,2 \pm 1,0$	$54,9 \pm 2,2$
1, o	$7,9 \cdot 10^8$	156 ± 5	153 ± 5	60 ± 3	$19,4 \pm 1,0$	$51,4 \pm 2,6$
2, o	$6,3 \cdot 10^7$	285 ± 3	288 ± 3	66 ± 2	$3,8 \pm 0,2$	
1, u	$3,2 \cdot 10^8$	160 ± 6	159 ± 7	60 ± 3	$6,2 \pm 0,3$	135 ± 7
2, o	$4,0 \cdot 10^7$	285 ± 3	288 ± 3	66 ± 2	$2,4 \pm 0,1$	
1, a	$3,5 \cdot 10^8$	156 ± 6	155 ± 6	63 ± 3	$6,3 \pm 0,3$	139 ± 7
2, o	$4,0 \cdot 10^7$	285 ± 3	288 ± 3	66 ± 2	$2,4 \pm 0,1$	

Tabelle 5: Optimale Aufteilung der Simulationen 1 und 2 für N60-Bestrahlung im Vergleich zur Simulation ohne Aufteilung (o – analog, u – energieunabhängige Fenster, a – energieabhängige Fenster, N – optimale Quellteilchenanzahl, D^i/Φ – Dosis bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ , t – Simulationszeit, FOM – Effizienz, 99,73% Vertrauensbereich)

Simulation	N	D^1/Φ in fGy/cm ⁻²	D^2/Φ in fGy/cm ⁻²	D^3/Φ in fGy/cm ⁻²	t in h	FOM in h ⁻¹
ohne, o	$2,3 \cdot 10^9$	432 ± 5	430 ± 5	56 ± 2	$57,6 \pm 2,9$	$19,3 \pm 1,0$
ohne, u	$9,4 \cdot 10^8$	431 ± 4	434 ± 4	55 ± 2	$25,6 \pm 1,3$	$43,5 \pm 2,2$
ohne, a	$6,2 \cdot 10^8$	436 ± 4	431 ± 5	55 ± 2	$17,9 \pm 0,9$	$62,0 \pm 3,1$
1, o	$1,9 \cdot 10^9$	155 ± 3	147 ± 3	46 ± 2	$69,6 \pm 3,5$	$15,4 \pm 0,8$
2, o	$1,0 \cdot 10^8$	282 ± 2	287 ± 2	$11,5 \pm 0,4$	$4,0 \pm 0,2$	
1, u	$7,1 \cdot 10^8$	157 ± 2	149 ± 2	44 ± 2	$19,3 \pm 1,0$	$51,6 \pm 2,6$
2, o	$6,0 \cdot 10^7$	282 ± 3	287 ± 3	$11,5 \pm 0,5$	$2,4 \pm 0,1$	
1, a	$7,1 \cdot 10^8$	157 ± 2	149 ± 2	44 ± 2	$17,3 \pm 0,9$	$57,1 \pm 2,9$
2, o	$5,6 \cdot 10^7$	282 ± 3	287 ± 3	$11,5 \pm 0,6$	$2,2 \pm 0,1$	

Die Aufteilung in zwei analoge Simulationen führt bei N100 nur zu einer leichten Verbesserung der Effizienz. Wird für den Simulationsteil 2 mit Wasserphantom die Gewichtsfenstertechnik eingesetzt, so vergrößert sich die Effizienz auf etwa das Dreifache. Anstatt einen vollen Tag in Anspruch zu nehmen, ist das Ergebnis bereits innerhalb von etwa achteinhalb Stunden berechnet. Außerdem kann die Fenstertechnik auch bei der vollständigen Simulation ohne Aufteilung eine kleine Verringerung der Rechenzeit erzielen. Zwischen energieunabhängigen und -abhängigen Grenzen gibt es hierbei keinen signifikanten Unterschied.

Im Gegensatz dazu ist bei N60-Bestrahlung eine Aufteilung in zwei analoge Simulationen nicht mehr effizienzgewinnend. Durch den Einsatz der Gewichtsfenstertechnik lässt sich jedoch in beiden Situationen, mit und ohne Aufteilung, Rechenzeit einsparen. Der Effizienzgewinn ist in beiden Fällen etwa gleich. Die Rechenzeit sinkt von etwa zweieinhalb Tagen auf den Bereich von 19 h bis 26 h. Es zeigt sich ein Unterschied zwischen den beiden Technikarten, unabhängige Fenster benötigen ca. sechs bzw. zwei Stunden weniger Simulationszeit.

3 Bestrahlung mit N15

3.1 Aufteilung in zwei Simulationen

In der Tabelle 6 sind die Ergebnisse für die optimale Aufteilung in zwei Simulationen mit und ohne Wasserphantom aufgelistet. Zum Vergleich sind die Ergebnisse der analogen Monte Carlo Methode ohne Veränderung der Geometrie aufgeführt. Die Aufteilung in zwei analoge Simulationen resultiert bei N15-Bestrahlung in eine Verringerung der Effizienz um etwa ein Viertel. Erst durch den Einsatz der Gewichtsfenster im gesamten Wasserphantom kommt es zu einer Einsparung von ca. zwei Dritteln der Rechenzeit. Außerdem zeichnet sich eine geringere Effizienz der energieabhängigen Technik ab.

Tabelle 6: Optimale Aufteilung der Simulationen 1 und 2 für N15-Bestrahlung im Vergleich zur analogen Simulation ohne Aufteilung (o – analog, u – energieunabhängige Fenster, a – energieabhängige Fenster, N – optimale Quellteilchenanzahl, D^i/Φ – Dosis bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ , t – Simulationszeit, FOM – Effizienz, 99,73% Vertrauensbereich)

Simulation	N	D^1/Φ in fGy/cm ⁻²	D^2/Φ in fGy/cm ⁻²	D^3/Φ in fGy/cm ⁻²	t in h	FOM in h ⁻¹
ohne	$3,9 \cdot 10^9$	2911 ± 6	1487 ± 5	$15,1 \pm 0,5$	$85,3 \pm 4,3$	$13,0 \pm 0,7$
1, o	$5,0 \cdot 10^9$	$62,8 \pm 1,3$	$25,1 \pm 1,1$	$3,7 \pm 0,5$	$90,2 \pm 4,5$	$9,9 \pm 0,5$
2, o	$1,8 \cdot 10^8$	2840 ± 3	1475 ± 3	$14,7 \pm 0,3$	$22,9 \pm 1,1$	
1, u	$1,9 \cdot 10^9$	$64,0 \pm 1,3$	$25,3 \pm 0,9$	$3,8 \pm 0,4$	$21,6 \pm 1,1$	$31,3 \pm 1,6$
2, o	$1,1 \cdot 10^8$	2840 ± 4	1475 ± 3	$14,7 \pm 0,3$	$14,4 \pm 0,7$	
1, a	$3,4 \cdot 10^9$	$62,0 \pm 1,3$	$24,9 \pm 0,9$	$3,6 \pm 0,4$	$26,6 \pm 1,3$	$27,3 \pm 1,4$
2, o	$1,2 \cdot 10^8$	2840 ± 4	1475 ± 3	$14,7 \pm 0,3$	$15,3 \pm 0,8$	

Weiterhin zeigt sich, dass die Dosiswerte für die Elemente 2 und 3 der analogen Simulation durch die Aufteilung signifikant überschätzt werden. Der Unterschied liegt jedoch nur bei etwa 10 fGy/cm⁻² bzw. bei 0,2% der Gesamtdosis und ist folglich vernachlässigbar.

3.2 Verkleinerte Quelle

Die Ergebnisse für die Bestrahlung mit kleinerem Quellquerschnitt sind in der Tabelle 7 dargestellt. Zum Vergleich sind auch hier die Ergebnisse der analogen Monte Carlo Methode ohne Veränderung der Geometrie aufgeführt.

Tabelle 7: N15-Bestrahlung mit verkleinerter Quelle im Vergleich zur analogen Simulation ohne Veränderung (o – analog, u – energieunabhängige Fenster, a – energieabhängige Fenster, N – optimale Quellteilchenanzahl, D^i/Φ – Dosis bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ , t – Simulationszeit, FOM – Effizienz, 99,73% Vertrauensbereich)

Simulation	N	D^1/Φ in fGy/cm ⁻²	D^2/Φ in fGy/cm ⁻²	D^3/Φ in fGy/cm ⁻²	t in h	FOM in h ⁻¹
ohne	$3,9 \cdot 10^9$	2911 ± 6	1487 ± 5	$15,1 \pm 0,5$	$85,3 \pm 4,3$	$13,0 \pm 0,7$
o	$1,2 \cdot 10^8$	2878 ± 6	1480 ± 5	$15,5 \pm 0,5$	$6,8 \pm 0,3$	162 ± 8
u	$8,2 \cdot 10^7$	2881 ± 36	1481 ± 6	$15,4 \pm 0,5$	$2,5 \pm 0,1$	438 ± 22
a	$1,0 \cdot 10^8$	2868 ± 26	1482 ± 4	$15,1 \pm 0,5$	$3,6 \pm 0,2$	311 ± 16

Die Verkleinerung des Quellquerschnitts auf etwa ein Dreißigstel führt erwartungsgemäß zu einer weiteren Verringerung der Simulationszeit. Der Effizienzgewinn für die analoge Simulation liegt im Bereich einer Größenordnung. Durch die Gewichtsfenstertechnik kann dieser noch nahezu Verdreifacht werden. Die Rechenzeit sinkt insgesamt von dreieinhalb Tagen auf ca. drei Stunden. Auch hier ist die energieabhängige Technik weniger effizient, da die Simulation eine Stunde länger andauert.

Durch den Vergleich der Standardunsicherheit wird erneut die Wirkung der Gewichtsfenster deutlich. Da bei der Generatorsimulation das dritte Element den einzigen Detektor darstellte, werden die Beiträge zu den anderen Dosimiterelementen vernachlässigt. Dies resultiert in eine größere statistische Messabweichung für das Element 1 mit Luftfilter, welcher im Vergleich zum Teflonfilter ein etwa um eine Größenordnung größeres Überlebensgewicht besitzt.

Im Rahmen ihrer Standardunsicherheit stimmen alle Ergebnisse überein. Nur die Dosis des ersten Elements wird bei der analogen Simulation mit verkleinerter Quelle signifikant um etwa 1% unterschätzt. Gemessen an der Gesamtdosis entspricht dies jedoch nur 0,5%. Da die Dosiswerte der anderen Elemente mit der Vorgabe übereinstimmen, handelt es sich hier um eine zufällige Messabweichung.

3.3 Verkleinerte Quelle und kleines Phantom

Die Ergebnisse für die Bestrahlung mit verkleinerter Quelle und kleinem Wasserphantom sind in der Tabelle 8 dargestellt. Die analoge Simulation benötigt gegenüber der analogen Monte Carlo Methode mit verkleinertem Quellquerschnitt und unverändertem Phantom aus Tabelle 7 nur noch die Hälfte der Rechenzeit. Demnach benötigen alle Simulationsarten eine Rechenzeit von etwa drei Stunden. Die Gewichtsfenstertechnik kann keine weitere Effizienzsteigerung bewirken. Folglich haben das Weglassen eines Raumbereichs und das Belegen mit einem sehr hohen Überlebensgewicht von in diesem Fall $w_S \approx 100$ den gleichen Effekt.

Tabelle 8: N15-Bestrahlung mit verkleinerter Quelle und verkleinertem Wasserphantom im Vergleich zur analogen Simulation ohne Veränderung (o – analog, u – energieunabhängige Fenster, a – energieabhängige Fenster, N – optimale Quellteilchenanzahl, D^i/Φ – Dosis bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ , t – Simulationszeit, FOM – Effizienz, 99,73% Vertrauensbereich)

Simulation	N	D^1/Φ in fGy/cm ⁻²	D^2/Φ in fGy/cm ⁻²	D^3/Φ in fGy/cm ⁻²	t in h	FOM in h ⁻¹
ohne	$3,9 \cdot 10^9$	2911 ± 6	1487 ± 5	$15,1 \pm 0,5$	$85,3 \pm 4,3$	$13,0 \pm 0,7$
o	$1,1 \cdot 10^8$	2884 ± 6	1481 ± 5	$15,5 \pm 0,5$	$3,1 \pm 0,2$	357 ± 18
u	$6,8 \cdot 10^7$	2886 ± 32	1479 ± 5	$15,4 \pm 0,5$	$2,6 \pm 0,1$	430 ± 22
a	$1,4 \cdot 10^8$	2872 ± 29	1483 ± 4	$15,2 \pm 0,5$	$3,4 \pm 0,2$	327 ± 16

3.4 Vernachlässigung des dritten Elements mit Bleifilter

In den bisherigen Simulationen wurden immer die Dosiswerte aller drei Elemente berechnet. Da das dritte Element mit Bleifilter bei N15-Bestrahlung nur etwa 15 fGy/cm⁻² bzw. einen Anteil von 0,3% an der Gesamtdosis misst, könnte die Berechnung dieses Ergebnisses auch vernachlässigt werden. Die Effizienz der Simulation mit verkleinertem Quellquerschnitt, kleinem Wasserphantom und ohne Berücksichtigung des dritten Elements ist in Tabelle 9 dargestellt.

Tabelle 9: N15-Bestrahlung mit verkleinerter Quelle, verkleinertem Wasserphantom und ohne Berücksichtigung des Elements 3 mit Bleifilter im Vergleich zur analogen Simulation ohne Veränderung (o – analog, u – energieunabhängige Fenster, a – energieabhängige Fenster, N – optimale Quellteilchenanzahl, D^i/Φ – Dosis bezogen auf die Quellteilchenfluenz Φ , t – Simulationszeit, FOM – Effizienz, 99,73% Vertrauensbereich)

	N	D^1/Φ in fGy/cm ⁻²	D^2/Φ in fGy/cm ⁻²	D^3/Φ in fGy/cm ⁻²	t in min	FOM in h ⁻¹
ohne	$3,9 \cdot 10^9$	2911 ± 6	1487 ± 5	$15,1 \pm 0,5$	5120 ± 260	$13,0 \pm 0,7$
o	$1,2 \cdot 10^6$	2878 ± 61	1482 ± 44	$0,0 \pm 0,0$	$2,0 \pm 0,1$	$(33,5 \pm 1,7) \cdot 10^3$
u	$6,5 \cdot 10^5$	2881 ± 63	1481 ± 44	$0,0 \pm 0,0$	$1,1 \pm 0,6$	$(63,4 \pm 3,2) \cdot 10^3$
a	$7,4 \cdot 10^5$	2880 ± 61	1480 ± 44	$0,0 \pm 0,0$	$1,2 \pm 0,1$	$(57,9 \pm 2,9) \cdot 10^3$

Die notwendige Simulationszeit, um alle Dosiswerte mit einer relativen Standardunsicherheit von höchstens 3% zu berechnen, sinkt von dreieinhalb Tagen auf den Bereich von wenigen Minuten. Dies entspricht einer Effizienzsteigerung um drei Größenordnungen. Der Einsatz der Gewichtsfenster-technik sorgt noch einmal für eine Verdopplung der FOM. Hierbei sind von der Energie abhängige und unabhängige Fenster gleichwertig. Für die Elemente 1 und 2 stimmen alle Messergebnisse mit der Vorgabe überein.

4 Literatur

- [1] D.E. CULLEN, J.H. HUBBELL, L. KISSEL: „EPDL97: the evaluated photon data library, '97 version“, UCRL-50400, 6 (5), 1–28, 1997.

Danksagung

Ich möchte mich bei PD Dr. Jürgen Henniger für die jahrelange Aus- und Weiterbildung im Fachbereich Strahlungsphysik und für gebotene Möglichkeit zur Durchführung von Forschungs- und Entwicklungsaufgaben im Bereich Monte Carlo Methoden bedanken. Außerdem bedanke ich mich für die Betreuung dieser Dissertation und für die Hilfestellungen bei der Anfertigung.

Weiteren Dank gilt Prof. Dr. Kai Zuber und Prof. Dr. Eduardo Caselli für die Begutachtung dieser Arbeit.

Insbesondere bei Dr. Kai Helbig, Dora Sommer, Uwe Reichelt und Dr. Erik Pönitz möchte ich mich für die zahlreichen Diskussionen sowie für die Hilfestellung und Unterstützung bedanken.

Dr. Axel Jahn danke ich für die Bereitstellung der Geometrie zur Simulation der Bestrahlung eines Personendosimeters.

Allen anderen Mitgliedern der Arbeitsgruppe, insbesondere Tobias Teichmann und Jan Sponner, danke ich für die vielen Kaffeepausen zur Ablenkung vom Arbeitsstress und für die freundliche und hilfsbereite Zusammenarbeit.

Christoph Jakobi

Versicherung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die vorliegende Dissertation wurde am Institut für Kern- und Teilchenphysik der Technischen Universität Dresden unter der wissenschaftlichen Betreuung von PD Dr. Jürgen Henniger angefertigt.

Es haben keine früheren erfolglosen Promotionsverfahren stattgefunden.

Ich erkenne die Promotionsordnung der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften an der Technischen Universität Dresden vom 23.02.2011 in der Fassung vom 18.06.2014 an.

Dresden, den

Dipl.-Phys. Christoph Jakobi
